ORSAY
Série A. N°
N° d'ordre
732

N° d'ordre

Paris

THÈSE

DE DOCTORAT D'ÉTAT ES-SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE A LA

FACULTÉ DES SCIENCES D'ORSAY

PAR

Sylvain LIBERMAN

LABORATOIRE AIMÉ COTTON

C. N. R. S.

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES

Sujet :

Études de structures hyperfines et d'effets isotopiques dans les raies laser infrarouges de gaz rares.

SOUTENUE LE Janvier 1971 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

M. P. JACQUINOT : PRÉSIDENT

M. A. KASTLER
M. J. BROCHARD } EXAMINATEURS
M. B.R. JUDD

N° d'ordre

THÈSE

DE DOCTORAT D'ÉTAT ES-SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE A LA

FACULTÉ DES SCIENCES D'ORSAY

PAR

Sylvain LIBERMAN

LABORATOIRE AIMÉ COTTON

C. N. R. S.

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES

Sujet :

Études de structures hyperfines et d'effets isotopiques dans les raies laser infrarouges de gaz rares.

SOUTENUE LE Janvier 1971 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

M. P. JACQUINOT : PRÉSIDENT

M. A. KASTLER
M. J. BROCHARD
M. B. R. JUDD
} EXAMINATEURS

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

TABLE DES MATIERES

Pages

INTRODUCTION 1

CHAPITRE I - RECHERCHE ET CLASSIFICATION DE RAIES LASER INFRAROUGES DANS LES GAZ 5

I - A - LA SOURCE LASER 5

I - A - 1 - Les caractéristiques géométriques 6

I - A - 2 - Caractéristiques électriques 7

I - A - 3 - Conditions de pression 8

I - B - TRANSITIONS LASER OBSERVEES DANS LES GAZ RARES 9

I - B - 1 - Enregistrements et mesures 9

I - B - 2 - Classification des transitions 10

I - B - 3 - Transitions laser de l'hélium 11

I - B - 4 - Transitions laser du néon 13

I - B - 5 - Transitions laser de l'argon 16

I - B - 6 - Transitions laser du krypton 17

I - B - 7 - Transitions laser du xénon 19

I - C - TRANSITIONS LASER OBSERVEES DANS D'AUTRES GAZ 21

I - C - 1 - Transitions laser de l'oxygène atomique 21

I - C - 2 - Expériences éffectuées dans les vapeurs métalliques ... 23

CHAPITRE II - ETUDES A TRES HAUTE RESOLUTION DES STRUCTURES HYPERFINES ET DEPLACEMENTS ISOTOPIQUES DES RAIES LASER INFRAROUGES DANS LES GAZ RARES 25

II - A - MONTAGE D'ANALYSE A HAUTE RESOLUTION AVEC UN INTERFEROMETRE DE FABRY-PEROT EXTERIEUR A LA CAVITE LASER 25

II - A - 1 - Schéma général du montage 25

II - A - 2 - L'interféromètre de Fabry-Perot 26

II - A - 3 - Etalonnage de l'intervalle entre ordres 28

II - A - 4 - Le monochromateur 29

Pages

II - B - MESURE DES STRUCTURES HYPERFINES 29

II - B - 1 - Xénon - 129 31

II - B - 2 - Xénon - 131 37

II - B - 3 - Néon - 21 41

II - C - INTERFEROMETRE DE FABRY-PEROT SELECTEUR 44

II - C - 1 - Description de l'interféromètre 44

II - C - 2 - Enregistrements 46

II - D - MESURES DE DEPLACEMENTS ISOTOPIQUES 47

II - D - 1 - Mesures dans l'argon entre les isotopes 36 et 40 47

II - D - 2 - Mesures dans le xénon entre les isotopes 129 et 131 .. 48

II - D - 3 - Mesures sur le néon entre les isotopes 20 et 22 49

II - D - 4 - Cas de l'hélium 51

CHAPITRE III - INTERPRETATION THEORIQUE DES STRUCTURES HYPERFINES 57

INTRODUCTION 57

III - A - TRAITEMENT CLASSIQUE 58

III - A - 1 - Expressions des hamiltoniens 59

III - A - 2 - Calcul des énergies - Formule de Casimir 61

III - A - 3 - Cas des configurations étudiées 64

III - A - 4 - Cas du néon 21 65

III - A - 5 - Cas du xénon 129 72

III - B - STRUCTURE HYPERFINE MAGNETIQUE ET CORRECTIONS RELATIVISTES 73

III - B - 1 - Expression de l'hamiltonien effectif 74

III - B - 2 - Calcul des énergies d'interaction magnétique 76

III - B - 3 - Application au xénon 129 76

III - C - STRUCTURE HYPERFINE QUADRUPOLAIRE ET CORRECTIONS RELATIVISTES . 84

III - C - 1 - Expression de l'hamiltonien 84

III - C - 2 - Calcul des énergies d'interaction quadrupolaire 85

III - C - 3 - Application au xénon 131 86

Pages

III - D - EFFETS DES INTERACTIONS DE CONFIGURATIONS LOINTAINES 91
III - D - 1 - Principe du calcul 92
III - D - 2 - Classification des effets 92
III - D - 3 - Conclusions 94

CONCLUSION 97

ANNEXE I - RAPPELS DE DEFINITIONS ET PROPRIETES DES CAVITES LASER 101

ANNEXE II - ETUDE PARAMETRIQUE DES CONFIGURATIONS BASSES DE Ne I et Xe I. 105

A - II - 1 - SPECTRE DE Ne I 106
A - II - 1 - a - Configurations impaires 106
A - II - 1 - b - Configurations paires $2p^5(3p + 4p + 5p)$ 114

A - II - 2 - SPECTRE DE Xe I 122
A - II - 2 - a - Configurations impaires $5p^5(6s + 5d)$ 122
A - II - 2 - b - Configurations paires $5p^5(6p + 7p)$ 126

ANNEXE III - CALCUL DES CONSTANTES DE STRUCTURE HYPERFINE MAGNETIQUE ET QUADRUPOLAIRE DES NIVEAUX DE $p^5n\ell$ EN COUPLAGE $j - \ell$ PUR . 131
A - III - 1 - STRUCTURE MAGNETIQUE 131

A - III - 2 - STRUCTURE QUADRUPOLAIRE 132

BIBLIOGRAPHIE 137

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41543511_0028

INTRODUCTION

Les premières expériences de spectroscopie des raies laser, qui suscitèrent l'intérêt de nombreux chercheurs, suivirent de peu d'années la découverte des laser à gaz (1960). Le début de leur exploitation intensive se situe approximativement au lendemain de la 3e Conférence Internationale d'Electronique Quantique, qui se tint à Paris en Février 1963 [1]. De cette époque date la mise en oeuvre au Laboratoire Aimé Cotton d'une série d'expériences utilisant des laser à gaz rares à des fins spectroscopiques. Les propriétés de ces sources lumineuses paraissaient en effet ouvrir la voie à de nouvelles investigations, en particulier dans le domaine infrarouge, où la faible énergie des transitions spontanées, ainsi que les faibles rendements quantiques des détecteurs disponibles, imposaient de sévères limitations aux observations expérimentales en spectroscopie d'émission. Ce domaine permettait en outre, les élargissements par effet Doppler devenant plus faibles, d'améliorer notablement la limite de résolution. De substantiels progrès avaient néanmoins pu être réalisés en ce qui concerne les instruments; ils avaient permis l'exploration de la région $0,8\mu$ - $2,5\mu$ notamment dans les spectres des terres rares [2][3]. Ces réalisations avaient clairement montré l'intérêt du domaine de l'infrarouge pour l'étude des configurations d'énergies élevées. Aussi, l'observation d'un nombre suffisamment important de transitions laser infrarouges au delà de $2,5\mu$, la forte intensité de ces raies ainsi que la faible étendue des faisceaux, laissaient espérer de nouveaux progrès et l'extension des mesures à de plus grandes longueurs d'onde.

De nombreuses expériences ont alors été faites, le choix de la méthode étant déterminé par la nature des grandeurs spectroscopiques à mesurer et les propriétés spécifiques de l'émission laser. La grande variété des montages réalisés se prête

mal à une classification. Certains utilisent l'oscillation du laser sur un mode unique, d'autres sur des modes multiples, quelques uns mettent à profit les propriétés de cohérence du faisceau, d'autres encore sa polarisation. Quand aux grandeurs mesurées, elles sont aussi diverses que celles qu'on peut atteindre par les méthodes de spectroscopie classique, qu'il s'agisse des longueurs d'onde, des structures hyperfines et isotopiques, des facteurs de Landé, des durées de vie etc...

Des considérations très simples ont présidé au choix des caractéristiques de la source laser que nous avons réalisée. Il s'agissait d'observer l'effet laser sur un nombre maximal de transitions. Pour celà, il fallait obtenir que le gain initial (c'est-à-dire en l'absence d'oscillation laser) par longueur de tube G_i, soit supérieur aux pertes, même pour des raies faiblement amplifiées. Nous avons donc entrepris la construction d'un laser de grande longueur ($L = 7m$ entre miroirs) de façon à accroître G_i. La grande longueur de cavité entraîne des intervalles de fréquence faibles entre les modes, de sorte que l'oscillation laser s'établit généralement sur des modes nombreux et serrés. Dans un enregistrement spectrométrique à haute résolution, cette structure est alors facilement masquée par la fonction d'appareil; on obtient des raies non déplacées dont la forme (enveloppe des modes) est souvent assez voisine de la forme Doppler.

Des montages très semblables à ceux utilisés en spectrométrie classique à haute résolution, permettent alors une étude systématique des structures des raies laser intenses émises. Un interféromètre de Fabry-Perot, adapté aux régions spectrales étudiées, a donc été mis au point. Les mesures accessibles par ce type d'instrument, correspondent de façon privilégiée aux structures hyperfines et déplacements isotopiques. Ainsi, le présent travail s'interesse à divers effets hyperfins dans les transitions laser infrarouges de plusieurs gaz rares, notamment à la structure hyperfine magnétique et électrique des isotopes impairs du néon et du xénon, et à l'effet isotopique de plusieurs transitions de l'hélium de l'argon, du xénon et du néon.

Cependant, l'apparition d'effets non linéaires est intimement liée à l'oscillation laser, en particulier l'intensité des raies laser n'obéit pas à des lois

simples [4]. En outre, des phénomènes de compétition perturbent la distribution des populations entre sous niveaux hyperfins. C'est ainsi que les composantes hyperfines d'une même raie laser ont des intensités très différentes de celles que prévoit la théorie dans le cas de l'émission spontanée : non seulement les rapports ne sont pas respectés, mais encore certaines composantes n'apparaissent pas. Les structures observées étant donc le plus souvent incomplètes, l'identification des composantes pose des problèmes quelquefois délicats. Aussi, quels que soient les arguments invoqués pour procéder à ces identifications, il s'est révélé indispensable de vérifier soigneusement les résultats expérimentaux par une interprétation théorique aussi précise que possible. Cet impératif nous a conduit naturellement à entreprendre une étude théorique complète, effectuée en deux temps. Dans un premier temps, l'interprétation des énergies des niveaux des configurations mises en jeu dans les transitions observées, permet d'exprimer les vecteurs propres de chacun de ces niveaux sur une base préalablement choisie de vecteurs propres correspondant à un couplage extrême. La méthode utilisée, très directement liée à l'approximation du champ central, est la méthode paramétrique. Les vecteurs propres ainsi obtenus, sont utilisés dans un deuxième temps pour calculer les constantes de structure hyperfine des niveaux, au moyen de paramètres électroniques ajustables. Le formalisme général employé dans ces calculs, est celui de l'algèbre de Racah [5]; dans le cas de la structure hyperfine étudiée ici, il ne fait intervenir que des opérateurs tensoriels irréductibles et monoélectriques.

L'exposé qui va suivre comprend trois chapitres :

- Le premier est consacré à la description du grand laser. Il contient la liste des transitions qui ont été observées, et donne leur classification.

- Le second s'intéresse aux divers dispositifs de spectrométrie à haute résolution qui ont été réalisés. Il donne le résultat des mesures de structures hyperfines et de déplacements isotopiques que ces instruments ont permis d'effectuer.

- Le dernier chapitre rend compte de l'interprétation théorique des constantes mesurées de structure hyperfine.

CHAPITRE I

RECHERCHE ET CLASSIFICATION DE RAIES LASER INFRAROUGES DANS LES GAZ

La construction et la mise au point du grand laser qui nous a servi de source, ont constitué la première phase de ce travail. Elle a été suivie d'une investigation des spectres de raies laser émis dans l'infrarouge par divers gaz rares. L'identification et la mesure des longueurs d'onde des transitions observées ont permis de procéder ensuite à leur classification. Le chapitre est donc consacré à une description de la source, des conditions expérimentales variées dans lesquelles elle a fonctionné. La liste des longueurs d'onde des transitions observées y est dressée, comprenant en particulier les transitions nouvelles; elle est accompagnée d'éventuelles remarques chaque fois qu'une propriété ou un comportement plus caractéristiques ont paru mériter d'être soulignés. Une dernière partie, plus brève, rend compte d'expériences et d'observations éffectuées avec d'autres gaz, pour lesquels les développements ultérieurs n'ont pas été jusqu'ici aussi fructueux qu'avec les gaz rares.

I - A - LA SOURCE LASER -

Nous décrivons successivement les caractéristiques de la géométrie du montage, de la pression des gaz et de l'alimentation électrique de la décharge.

I - A - 1 - Les caractéristiques géométriques (voir photo I)

Le tube laser, en verre pyrex, permet l'établissement d'une décharge lumineuse sur une longueur de 6 mètres. Le diamètre intérieur du tube, $d = 14mm$, a été choisi assez voisin de la valeur donnée par la formule $d = 2\sqrt{\lambda L}$ (où λ est une longueur d'onde moyenne et L la longueur de la cavité, ici $\lambda = 6\mu$ et $L = 7m$). Ces valeurs correspondent à $N = d^2/\lambda L \simeq 4$, nombre pour lequel les pertes sur la puissance transportée par l'onde, dues à la diffraction, sont relativement faibles, en particulier pour les modes dominants (cf. Annexe I). Pour $\lambda = 15\mu$ on a $N = 1,87$ valeur correspondant à des pertes encore acceptables à cette longueur d'onde.

Le tube est fermé à ses extrémités par des fenêtres inclinées à l'angle de Brewster sur l'axe du tube. Ces fenêtres sont en fluorine ou en sel gemme selon qu'on étudie les longueurs d'onde inférieures à 8μ , ou comprises entre 8μ et 15μ . L'énergie nécessaire aux observations est prélevée par réflexion vitreuse sur une glace auxiliaire verticale, tout comme les fenêtres de sortie qui imposent la polarisation (le champ électrique $\vec{E}$ de l'onde est alors horizontal). L'angle d'incidence sur la glace peut être choisi entre $45°$ et $65°$. Une amélioration sensible du montage, permettant d'éviter certains phénomènes de compétition entre raies à niveaux communs, a été réalisée en remplaçant la glace de prélèvement précédente par un prisme de petit angle ($10°$). L'une des faces du prisme est à l'incidence de Brewster, l'autre, à $45°$, sert au prélèvement de la lumière. Par la suite, un dispositif plus élaboré, comprenant un prisme de grand angle ($69°$) en fluorine, a été substitué au prisme de petit angle (voir photo II). Ce dispositif à prisme "sélecteur" demande évidemment un réglage particulier de la cavité pour chacune des transitions donnant lieu à un effet laser, et nécessite par conséquent un étalonnage. Un tel dispositif se prête assez mal à la recherche des transitions, en outre il empêche les cascades; par contre il est très efficace pour éviter les compétitions entre raies.

La cavité est fermée par 2 miroirs externes sphériques, de même rayon de courbure, dorés et opaques, en position approximativement confocale c'est-à-dire ici distants de $L = 7m$. Dans ces conditions, l'écart entre 2 modes dominants

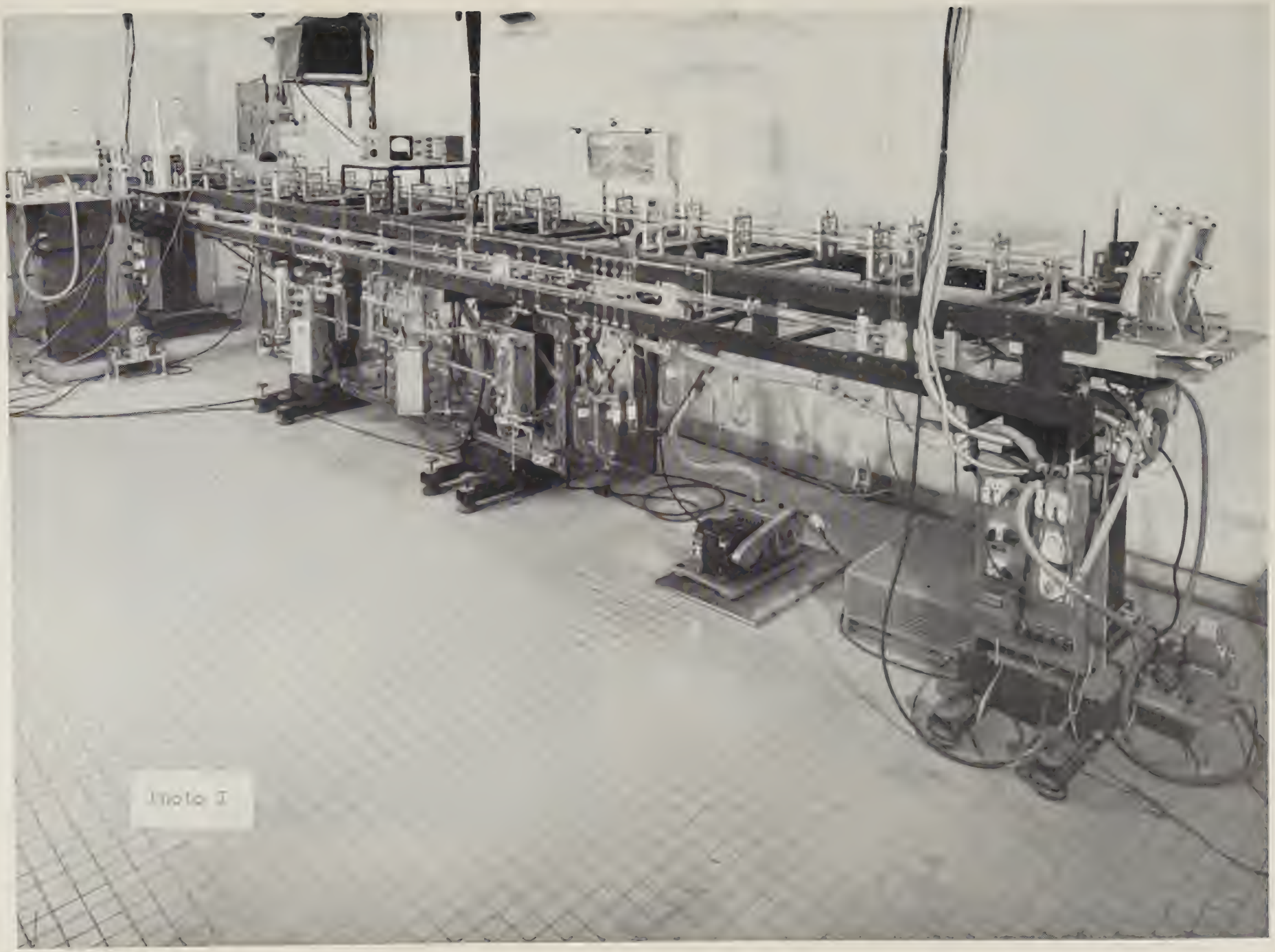
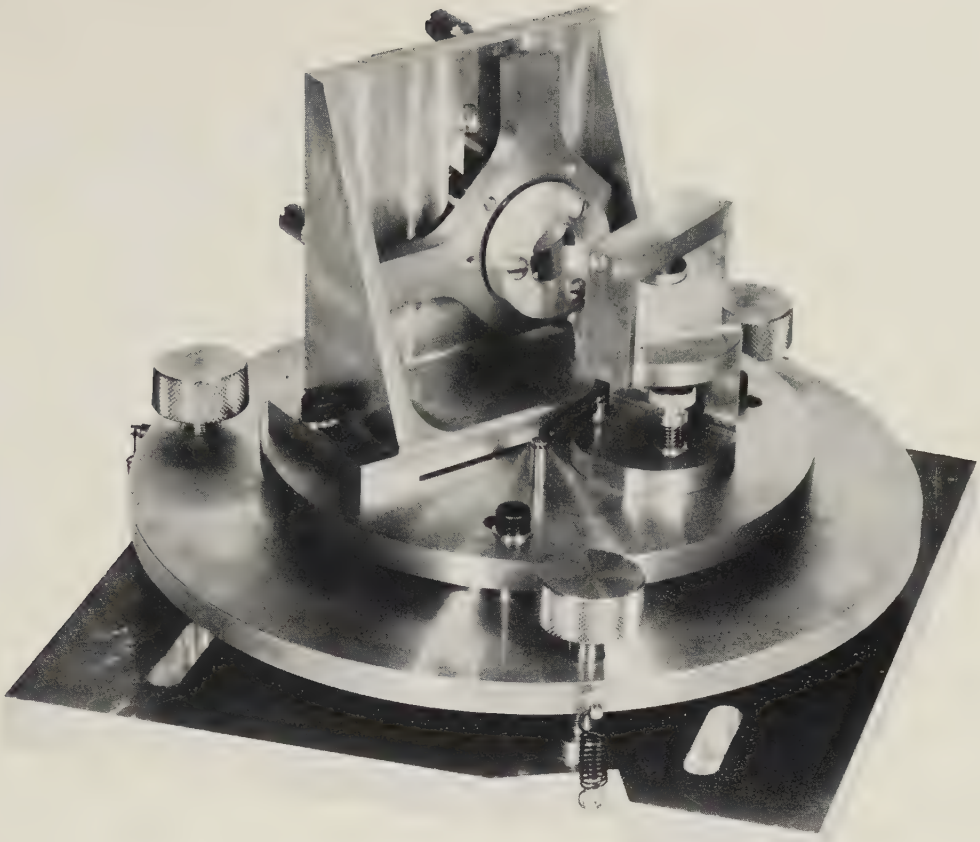


Photo I



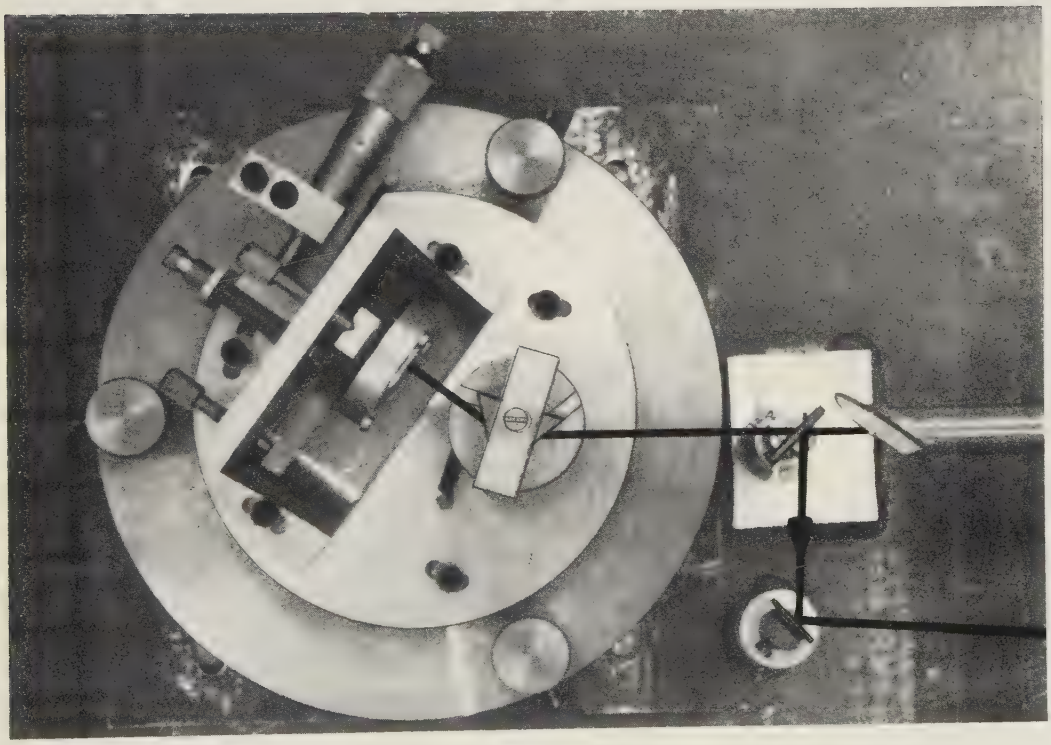


Photo II

voisins est de $\delta\sigma = 1/2L \simeq 0{,}7mK$ ($1mK = 10^{-3}$ cm^{-1} = 30 MHz). Cette quantité est à comparer aux largeurs Doppler $\Delta\sigma_D$ des transitions infrarouges étudiées : ainsi par exemple pour le néon à $\lambda = 3{,}4\mu$ on a $\Delta\sigma_D \simeq 9{,}2mK$, pour le xénon à $\lambda = 3{,}5\mu$ on a $\Delta\sigma_D \simeq 3{,}4mK$. On peut donc espérer qu'un certain nombre de modes (dominants et latéraux) oscillent simultanément dans la majeure partie du profil Doppler de la raie, ces modes étant assez sérrés pour que leur structure ne puisse être mise en évidence même par un instrument déjà très résolvant tel que l'étalon de Fabry-Perot que nous avons employé (cf. Chapitre II). En outre, l'ensemble du dispositif est construit sur un bâti métallique qui, bien que très rigide, est néanmoins le siège de vibrations mécaniques dont l'effet probable est une déformation périodique de la cavité (assez rapide à l'échelle des temps d'observation). Les modes oscillants sont certainement instables et les fréquences correspondantes "balayent" un petit intervalle. Le profil des raies laser apparait ainsi comme l'enveloppe de ces modes, centrée sur la fréquence de la transition atomique; il rappelle quelque peu la forme Doppler des transitions spontanées. Pour les raies à faible gain, les modes oscillants sont peu nombreux, la raie enregistrée est plus fine que le profil Doppler, son centre peut être déplacé de façon aléatoire (les modes n'ayant aucune raison d'être placés symétriquement par rapport au centre de raie).

L'espace libre compris entre chaque fenêtre de sortie et le miroir correspondant, peut être clos et rempli d'azote sec de façon à éviter l'absorption par l'air atmosphérique (notamment vers $\lambda = 4{,}2\mu$ où se trouve une bande de forte absorption de la vapeur d'eau).

La mise en place des divers éléments, leur alignement et d'une façon générale les différents réglages en position qu'exige une telle cavité ont été résolus par l'utilisation d'un petit laser visible à hélium-néon ($\lambda = 6328$ Å).

I - A - 2 - Caractéristiques électriques

La colonne gazeuse remplissant le tube est excitée en courant continu. L'intensité optimale du courant dépend évidemment de la nature du gaz excité, de sa pression, du mélange éventuel avec un autre gaz et aussi de la transition observée. Les intensités de décharges le plus souvent utilisées se situent approximativement

voisins est de $\delta\sigma = 1/2L \simeq 0{,}7mK$ ($1mK = 10^{-3}$ cm^{-1} = 30 MHz). Cette quantité est à comparer aux largeurs Doppler $\Delta\sigma_D$ des transitions infrarouges étudiées : ainsi par exemple pour le néon à $\lambda = 3{,}4\mu$ on a $\Delta\sigma_D \simeq 9{,}2mK$, pour le xénon à $\lambda = 3{,}5\mu$ on a $\Delta\sigma_D \simeq 3{,}4mK$. On peut donc espérer qu'un certain nombre de modes (dominants et latéraux) oscillent simultanément dans la majeure partie du profil Doppler de la raie, ces modes étant assez sérrés pour que leur structure ne puisse être mise en évidence même par un instrument déjà très résolvant tel que l'étalon de Fabry-Perot que nous avons employé (cf. Chapitre II). En outre, l'ensemble du dispositif est construit sur un bâti métallique qui, bien que très rigide, est néanmoins le siège de vibrations mécaniques dont l'effet probable est une déformation périodique de la cavité (assez rapide à l'échelle des temps d'observation). Les modes oscillants sont certainement instables et les fréquences correspondantes "balayent" un petit intervalle. Le profil des raies laser apparait ainsi comme l'enveloppe de ces modes, centrée sur la fréquence de la transition atomique; il rappelle quelque peu la forme Doppler des transitions spontanées. Pour les raies à faible gain, les modes oscillants sont peu nombreux, la raie enregistrée est plus fine que le profil Doppler, son centre peut être déplacé de façon aléatoire (les modes n'ayant aucune raison d'être placés symétriquement par rapport au centre de raie).

L'espace libre compris entre chaque fenêtre de sortie et le miroir correspondant, peut être clos et rempli d'azote sec de façon à éviter l'absorption par l'air atmosphérique (notamment vers $\lambda = 4{,}2\mu$ où se trouve une bande de forte absorption de la vapeur d'eau).

La mise en place des divers éléments, leur alignement et d'une façon générale les différents réglages en position qu'exige une telle cavité ont été résolus par l'utilisation d'un petit laser visible à hélium-néon ($\lambda = 6328$ Å).

I - A - 2 - Caractéristiques électriques

La colonne gazeuse remplissant le tube est excitée en courant continu. L'intensité optimale du courant dépend évidemment de la nature du gaz excité, de sa pression, du mélange éventuel avec un autre gaz et aussi de la transition observée. Les intensités de décharges le plus souvent utilisées se situent approximativement

entre 30 et 150mA . Sur le tube, des prises latérales espacées de 1m , aboutissent à des électrodes. Les 6 sections ainsi déterminées sont alimentées en parallèle. Chaque électrode intermédiaire débite donc dans les 2 sections de tube qui lui sont adjacentes : le partage du courant et la stabilité électrique du montage nécessitent des résistances séparées pour chacune des électrodes (voir fig.1).

Dans un premier temps nous avons employé des électrodes froides en aluminium, puis en acier inox. Ces électrodes nécessitaient un refroidissement individuel par courant d'air, assez énergique. Par la suite, elles ont pu être avantageusement remplacées par des électrodes à filament chaud, d'emploi beaucoup plus commode.

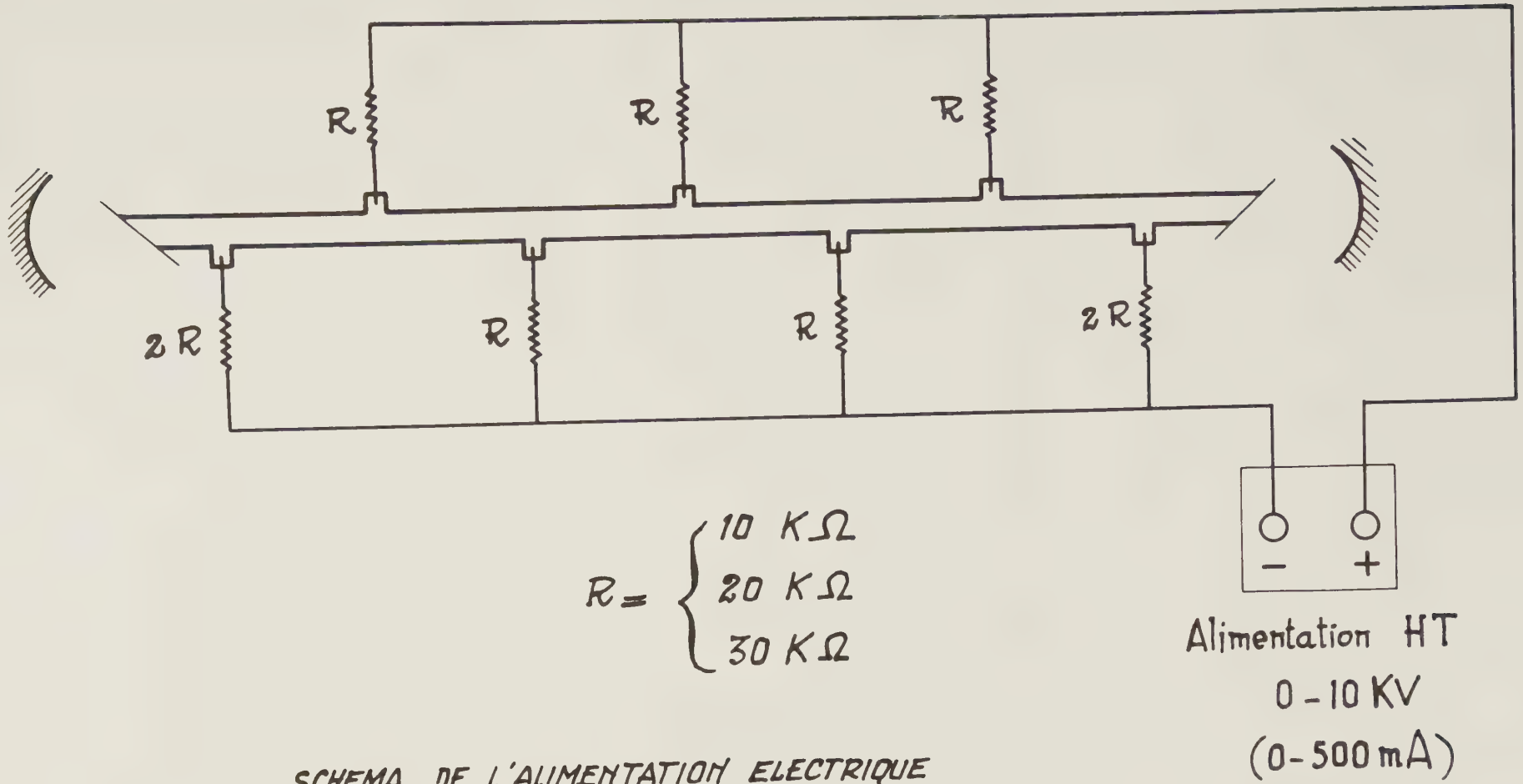
Le courant continu est débité par des alimentations, dont la haute tension est régulée et ajustable entre 1 et 10KV , le courant maximal étant de 500mA ; le taux d'ondulation résiduel est négligeable (inférieur à 100mV).

I - A - 3 - Conditions de pression

Un dispositif de pompage à 2 étages permet d'obtenir un vide suffisant dans des conditions raisonnables de rapidité. Une rampe à gaz adjacente au dispositif permet de remplir le tube du gaz à étudier à une pression ajustable.

Les pressions optimales à utiliser pour les différents gaz dépendent beaucoup du diamètre du tube, de l'intensité du courant de décharge, et aussi des mécanismes d'excitation qui contribuent à établir une inversion de population entre les niveaux d'une transition déterminée. Ces mécanismes sont très variés, les principaux sont les excitations par chocs électroniques à partir de l'état fondamental, les excitations par effets de cascades, les excitations par chocs avec des atomes d'espèce différentedans un état métastable, etc...

Dans ces conditions, un certain nombre de transitions ne donnent lieu à un effet laser que si le gaz étudié est mélangé à un autre gaz. Le gaz auxiliaire le plus souvent utilisé est ici l'hélium, à des pressions moyennes comprises entre 0,2 et 0,5 torrs. D'autres transitions, au contraire, apparaissant dans le gaz pur, voient leur oscillation annihilée par la présence d'un gaz étranger. Quelques autres, enfin, parmi les plus intenses, sont peu affectées par la présence d'hélium.



SCHEMA DE L'ALIMENTATION ELECTRIQUE

DU TUBE LASER

Fig. 1

Lorsque le gaz est utilisé pur, il est possible de dégager des conditions moyennes de pression pour lesquelles on observe un nombre maximal de transitions laser :

He	0,2 - 0,4	torrs
Ne	0,5 - 0,6	"
A	0,02 - 0,06	"
Kr	0,02	
Xe	0,01 - 0,06	"

I - B - TRANSITIONS LASER OBSERVEES DANS LES GAZ RARES -

En règle générale, le spectre d'émission laser des gaz rares, en particulier dans le proche et moyen infrarouge, est peu dense; il n'éxige pas l'utilisation de spectromètres très résolvants. Un simple monochromateur, muni de filtres judicieusement choisis, suffit généralement pour isoler une transition déterminée. La mesure des longueurs d'onde nécessite un balayage qui, dans le cas d'un réseau, est effectué mécaniquement. Ce balayage doit être régulier et suivre une loi connue et simple. La reproductibilité des mesures et en définitive leur précision, sont directement liées à cette condition. La loi peut être par exemple linéaire en longueur d'onde, ou bien en nombre d'onde.

I - B - 1 - Enregistrements et mesures

Un spectrophotomètre infrarouge à réseaux (Beckman IR-8) a été utilisé pour la détection des radiations et la mesure de leur longueur d'onde. Il permet en effet l'exploration d'un domaine spectral compris entre 2,5μ et 16μ , grâce à un détecteur thermopile et à des filtres passe-hauts (pour lever d'éventuelles ambiguités). Il est possible, en supprimant les filtres, d'étendre ce domaine du côté des courtes longueurs d'onde jusque vers 1μ . Le balayage du spectre, éffectué par le moyen de cames commandant la rotation du réseau, est assuré par un moteur synchrone auxiliaire à défilement lent. Le signal produit par le détecteur, convenablement amplifié, est enfin envoyé sur un enregistreur potentiométrique à vitesse de déroulement constante (et réglable).

La mesure des longueurs d'onde des transitions enregistrées, se fait assez commodément par interpolation entre 2 longueurs d'onde connues de radiations intenses et facilement identifiables. Les résultats sont obtenus par une moyenne sur un assez grand nombre de mesures. La précision n'est pas très élevée : de l'ordre de $20\mathring{A}$ pour l'ensemble du domaine spectral étudié, elle est suffisante pour permettre la classification de la presque totalité des transitions nouvelles observées. Cependant, un certain nombre de transitions laser, particulièrement celles de l'hélium, méritaient une mesure très précise de leur longueur d'onde. Cette mesure a fait l'objet d'une expérience particulière, réalisée par J.F. Lesprit [6], au moyen d'un interféromètre de Michelson (cf. II-D-4).

I - B - 2 - Classification des transitions

Le spectre des niveaux d'énergie des gaz rares non ionisés est assez bien connu [7], de sorte que la classification des transitions observées ne présente pas de difficulté particulière. Un programme de calcul [8] des différences entre les énergies des niveaux, tenant compte des règles de sélection impératives, classe en outre automatiquement les longueurs d'onde et nombres d'onde dans un ordre croissant ou décroissant. Dans la suite, les longueurs d'onde mesurées ou calculées, seront données dans le vide.

Remarque sur les notations des niveaux :

Il existe 2 systèmes de notations pour les niveaux dans les gaz rares non ionisés (hormis l'hélium) : celui de Paschen et celui plus récent de Racah. Ce dernier système est utilisé dans la suite, il rappelle en effet que le couplage pur le plus voisin du couplage réel est du type $j - \ell$. Les configurations $np^5 n'\ell$ présentent 2 groupes de niveaux construits chacun sur l'un des niveaux du doublet ^2P_j de l'ion. Dans ces conditions la notation complète pour un niveau est de la forme : $np^5\ ^2P_j\ n'\ell\ [K]\ J$, où j est égal à $1/2$ ou $3/2$, et où le nombre quantique K est associé aux valeurs propres du moment angulaire $\vec{K} = \vec{j} + \vec{\ell}$.

On a ensuite $\vec{J} = \vec{K} + \vec{s}$. On emploie de façon usuelle une notation abrégée

en omettant le coeur, et dans laquelle on indique les niveaux de $j = 1/2$ par une apostrophe. (Les vecteurs propres correspondants au couplage $j - \ell$ pur, sont repérés par les nombres quantiques j et K, de sorte que certains auteurs préfèrent appeler ce type de couplage : couplage $j - K$).

I - B - 3 - Transitions laser de l'Hélium

Deux transitions seulement ont été observées, elles sont précisées dans le tableau 1. Ces 2 transitions laser n'avaient pas, à notre connaissance, été observées auparavant.

TABLEAU 1

$\lambda_{mesurée}(\mu)$	$\lambda_{calculée}(\mu)$	Classification
4,606	4,6065	$5s\ ^1S_o \rightarrow 4p\ ^1P_1$
8,534	8,5294	$6s\ ^1S \rightarrow 5p\ ^1P_1$

Les mécanismes d'excitation qui conduisent à une inversion de population entre les niveaux des transitions observées sont complexes à analyser. Il faut tenir compte notamment des processus suivants :

- excitation par chocs électroniques.
- peuplement par cascades à partir de niveaux excités supérieurs.
- excitation par transfert d'énergie dans des collisions entre atomes. (par exemple : $He(n\ ^1P) + He(1\ ^1S) \rightarrow He(1\ ^1S) + He(n\ F)$)
- effets d'emprisonnement de radiations.

Ces différents processus interviennent avec des importances très variables selon les niveaux et les conditions générales d'excitation. Il est possible cependant, d'avoir une idée partielle des phénomènes en examinant les durées de vie connues de certains niveaux, comme l'ont fait Bridgett et King [9] pour expliquer

l'oscillation de plusieurs transitions. Ainsi, pour la transition $\lambda = 4{,}60\mu$ (cf. tableau 2), la durée de vie effective du niveau inférieur $4p\ ^1P_1$ devient nettement plus faible que celle du niveau supérieur $5s\ ^1S_0$ lorsque la pression du gaz s'écarte de la valeur nulle. Une inversion de population peut alors s'établir entre ces 2 niveaux, malgré la probabilité relativement forte d'excitation directe du niveau 4p par chocs électroniques sur des atomes dans l'état fondamental.

TABLEAU 2 - Durées de vie (exprimées en 10^{-9}s)

p_{torr} / niveaux	$_0$[9]	$_{0,02}$[10]	$_{0,5}$[9]
$5s\ ^1S_o$	150	115	105
$4p\ ^1P_1$	114	14	50

D'autres transitions laser de He I ont été observées par divers auteurs. Les conditions d'observation sont précisées dans le tableau 3; elles permettent de comprendre en partie pourquoi nous n'avons pas pu les observer dans notre tube.

TABLEAU 3

$\lambda(\mu)$	Classification	pression (torr)		d (mm)	L (cm)	références
0,7065	$3s\ ^3S_1 - 2p\ ^3P_{2,1}$	11 - 17 (+3torr H_2)	pulsée	5,5	80	[11]
1,8685	$4f\ ^3F \rightarrow 3\ ^3D$	0,4		6	175	[12]
1,9543	$4p\ ^3P \rightarrow 3d\ ^3D$	0,2	r - f	9	750	[13] [14]
2,0603	$7d\ ^3D \rightarrow 4p\ ^3P$	8	r - f	7	225	[15]
	$3p\ ^1P \rightarrow 3d\ ^1D$	0.5	pulsée	75	200-720	[16]

I - B - 4 - Transitions laser du néon [17]

Elles sont données dans le tableau 4, où les longueurs d'onde mesurées sont précisées pour les seules transitions nouvelles. Deux colonnes indiquent les conditions d'observation : gaz pur ou mélangé avec de l'hélium. Les chiffres de 1 à 5 correspondent à 5 classes d'intensité, le passage d'une classe à la suivante traduit une modification de l'intensité d'un facteur approximativement égal à 10 (le chiffre 0 signifie évidemment que la raie n'oscille pas). Cette présentation sera conservée dans la suite pour les autres gaz.

Les transitions les plus intenses se répartissent entre les groupes 5s - 4p et 4p - 3d . Certaines transitions anciennement connues [18] , en particulier celles des groupes 4d - 4p situées dans la région 2,5μ - 3μ , n'apparaissent pas. Mais les niveaux 4d sont essentiellement peuplés par les raies laser du groupe 5p - 4d situées pour la plupart entre 16μ et 23μ , et l'utilisation de fenêtres en fluorine ou en sel gemme interdit leur oscillation dans notre expérience. Enfin les raies laser du groupe 5s - 4p ne s'observent qu'en présence d'hélium : le niveau $1\ ^1S$ de He I , métastable, possède une énergie voisine de celles des niveaux de la configuration 5s de Ne I , ce qui permet leur peuplement par collisions.

TABLEAU 4 - Transitions laser du néon

$\lambda_{(mesurée)}(\mu)$	$\lambda_{(calculée)}(\mu)$	Ne pur	He - Ne	Classification
	1,1523	0	4	4s'[1/2]1 → 3p'[3/2]2
	3,0720	0	4	5s'[1/2]1 → 4p [1/2]0
	3,3182	0	4	5s [3/2]1 → 4p [5/2]2
	3,3342	0	4	5s'[1/2]1 → 4p'[3/2]1
	3,3912	0	4	5s'[1/2]1 → 4p'[1/2]1
	3,3922	0	5	5s'[1/2]1 → 4p'[3/2]2
	3,4481	0	3	5s [3/2]1 → 4p [3/2]1
3,450	3,4499	0	3	5s'[1/2]0 → 4p'[1/2]1
3,479	3,4790	0	3	5s [3/2]1 → 4p [3/2]2
	3,5845	0	4	5s [3/2]2 → 4p [3/2]2
	3,7746	0	4	4p'[1/2]0 → 3d [3/2]1
	4,2183	0	4	5s'[1/2]1 → 4p'[1/2]0
5,103	5,1082	3	0	4p'[3/2]1 → 3d [5/2]2
5,170	5,1710	3	0	5d'[5/2]2 → 5p'[3/2]1
5,326	5,3258	3	1	5d [5/2]2 → 5p [3/2]2
	5,3264			5d [3/2]1 → 5p [3/2]1
	5,4048	4	4	4p'[1/2]0 → 3d'[3/2]1
	5,6667	4	2	4p [1/2]0 → 3d [3/2]1
5,707	5,7069	0	2	5p'[1/2]1 → 5s'[1/2]0
5,779	5,7774	4	1	5p [5/2]3 → 5s [3/2]2
5,889	5,8860	0	2	5p'[3/2]1 → 5s'[1/2]1

TABLEAU 4 (suite)

5,960	5,9580	0	3	$5p\ [5/2]_2 \rightarrow 5s\ [3/2]_1$
6,778	6,7788	0	4	$6s\ [3/2]_2 \rightarrow 5p\ [1/2]_1$
6,987	6,9876	4	3	$4p\ [3/2]_2 \rightarrow 3d\ [3/2]_2$
	7,3228	0	2	$6s\ [3/2]_2 \rightarrow 5p\ [5/2]_3$
	7,4799	4	4	$4p\ [3/2]_2 \rightarrow 3d\ [5/2]_3$
	7,6163	3	3	$4p\ [3/2]_1 \rightarrow 3d\ [5/2]_2$
	7,6510	4	4	$4p\ [5/2]_2 \rightarrow 3d\ [7/2]_3$
	7,7015	4	4	$4p'[3/2]_2 \rightarrow 3d'[5/2]_3$
	7,7655	2	3	$4p'[1/2]_1 \rightarrow 3d'[3/2]_2$
	7,8368	0	2	$6s\ [3/2]_2 \rightarrow 5p\ [3/2]_2$
7,873	7,8715	2	3	$8p\ [3/2]_2 \rightarrow 7s\ [3/2]_2$
7,944	7,9428	0	2	$8p\ [5/2]_2 \rightarrow 7s\ [3/2]_2$
7,982	7,9846	0	2	$8s'[1/2]_1 \rightarrow 7p\ [1/2]_1$
	8,0088	3	3	$4p'[3/2]_1 \rightarrow 3d'[5/2]_2$
	8,0621	4	4	$4p\ [5/2]_3 \rightarrow 3d\ [7/2]_4$
	9,0896	0	2	$6s\ [3/2]_1 \rightarrow 5p\ [1/2]_0$
9,916	9,9181	2	2	$4p\ [1/2]_1 \rightarrow 3d\ [1/2]_0$
	10,063	1	2	$4p\ [1/2]_1 \rightarrow 3d\ [1/2]_1$
10,395	10,3981	2	0	$6p'[1/2]_0 \rightarrow 6s'[1/2]_1$
	10,981	2	2	$4p\ [1/2]_1 \rightarrow 3d\ [3/2]_2$
	11,9017	2	2	$5p\ [1/2]_0 \rightarrow 4d\ [3/2]_1$
	12,835	2	2	$5p'[1/2]_0 \rightarrow 4d\ [3/2]_1$
	13,759	0	2	$7s'[1/2]_1 \rightarrow 6p'[3/2]_2$

I - B - 5 - Transitions laser de l'argon [19]

TABLEAU 5 - Transitions laser de l'argon

$\lambda_{(mesurée)}(\mu)$	$\lambda_{(calculée)}(\mu)$	Ar pur	Ar - He	Classification
	2,0622	2	4	3d [3/2]2 → 4p'[3/2]2
	2,3139	0	3	3d [1/2]1 → 4p'[1/2]1
	2,3973	0	3	3d [1/2]0 → 4p'[1/2]1
	2,5014	2	0	6d'[3/2]2 → 6p [1/2]1
	2,5494	3	3	5p [5/2]3 → 3d [7/2]3
	2,5512			5p [1/2]0 → 5s [3/2]1
	2,5668	0	3	5p'[1/2]0 → 5s'[1/2]1
2,656	2,6550	0	2	5p'[3/2]1 → 3d'[5/2]2
	2,7364	2	3	5p'[1/2]1 → 3d'[3/2]2
	2,8783	2	2	5p [5/2]3 → 5s [3/2]2
	2,8843			5p [3/2]2 → 3d [5/2]3
	3,1333	0	3	5p [1/2]1 → 5s [3/2]2
4,206	4,2044	3	0	5p [3/2]2 → 3d'[3/2]2
4,714	4,7151	0	2	5p [5/2]3 → 3d'[5/2]3
	4,9160	2	0	6p'[3/2]2 → 4d'[3/2]2
	4,9213			5d [5/2]2 → 4f [7/2]3
	5,1216	2	0	6p [5/2]3 → 4d [7/2]3
	5,1218			5d [7/2]3 → 4f [9/2]4

TABLEAU 5 (suite)

5,390	5,3912	2	0	5p [1/2]1 → 3d'[3/2]2
	5,4680	2	0	5d [7/2]4 → 4f [9/2]5
	5,4694			5d [7/2]4 → 4f [9/2]4
5,803	5,8038	0	3	4d [3/2]2 → 5p [3/2]2
	5,8477	2	2	6p [1/2]0 → 6s [3/2]1
6,745	6,7462	0	3	6p [5/2]3 → 6s [3/2]2
	7,2166	0	3	6p [1/2]1 → 6s [3/2]2
10,439	10,4434	0	2	6d [7/2]4 → 5f [9/2]4,
11,036	11,0415	0	2	7s [3/2]1 → 7p [1/2]0

Plusieurs transitions laser de Ar^{+} I , mettant en jeu des niveaux 3d , 4d ou même 5d , sont assez intenses; elles ont été étudiées pour l'intérêt que présen l'effet isotopique des niveaux nd [20] (cf. II-D-1).

I - B - 6 - Transitions laser du krypton [19]

D'une façon générale l'observation et l'identification des raies laser du krypton, demandent quelques précautions : ce gaz tel qu'on peut l'obtenir ordinairement est pollué par le xénon dont les transitions laser sont extrêmement intenses beaucoup plus que celles du krypton; elles oscillent même avec de très faibles quantités de gaz (cf. I-B-7).

TABLEAU 6 - Transitions laser du krypton

$\lambda_{(mesurée)}(\mu)$	$\lambda_{(calculée)}(\mu)$	Kr pur	Kr - He	Classification
	2,5241	0	4	$4d\ [1/2]_1 \rightarrow 5p\ [3/2]_2$
	3,0672	0	2	$6p\ [1/2]_1 \rightarrow 6s\ [3/2]_2$
3,957	3,9568	2	3	$5d\ [3/2]_1 \rightarrow 6p\ [5/2]_2$
	3,9584			$7s\ [3/2]_2 \rightarrow 6p\ [5/2]_2$
	4,3748	3	0	$5d\ [3/2]_1 \rightarrow 6p\ [3/2]_2$
	4,3767			$7s\ [3/2]_2 \rightarrow 6p\ [3/2]_2$
4,993	4,9997	1	1	$4d'[3/2]_1 \rightarrow 6p\ [1/2]_1$
5,132	5,1312	2	2	$6s\ [3/2]_1 \rightarrow 5p'[3/2]_2$
	5,3000	3	3	$5d\ [3/2]_1 \rightarrow 6p\ [1/2]_0$
	5,3019			$5d\ [3/2]_2 \rightarrow 6p\ [5/2]_2$
	5,5863	3	3	$6d\ [7/2]_4 \rightarrow 4f\ [9/2]_5$
	5,6306	2	2	$6d\ [3/2]_2 \rightarrow 4f\ [5/2]_3$
7,365	7,3625	2	2	$4f\ [9/2]_5 \rightarrow 5d\ [7/2]_4$
9,65	9,6250	1	0	$6s\ [3/2]_1 \rightarrow 5p'[1/2]_0$
10,56	10,5455	1	0	$4d\ [5/2]_2 \rightarrow 5p'[1/2]_1$

I - B - 7 - Transitions laser du xénon [19]

TABLEAU 7 - Transitions laser du xénon

$\lambda_{(mesurée)}(\mu)$	$\lambda_{(calculée)}(\mu)$	Xe pur	Xe - He	Classification
	2,0268		4	$5d\ [3/2]_1 \rightarrow 6p\ [3/2]_1$
	2,6276	4	0	$5d\ [5/2]_2 \rightarrow 6p\ [5/2]_2$
	2,6518	3	0	$5d\ [3/2]_1 \rightarrow 6p\ [1/2]_0$
	3,1078	3	0	$5d\ [5/2]_3 \rightarrow 6p\ [3/2]_2$
	3,2748	4	2	$5d\ [3/2]_2 \rightarrow 6p\ [1/2]_1$
	3,3676	5	4	$5d\ [5/2]_2 \rightarrow 6p\ [3/2]_1$
	3,5080	5	5	$5d\ [7/2]_3 \rightarrow 6p\ [5/2]_2$
	3,6219	2	0	$5d'[3/2]_2 \rightarrow 7p\ [3/2]_2$
	3,6518	3	0	$7p\ [1/2]_1 \rightarrow 7s\ [3/2]_2$
	3,6798	5	5	$5d\ [1/2]_1 \rightarrow 6p\ [1/2]_1$
	3,6859	5	0	$5d\ [5/2]_2 \rightarrow 6p\ [3/2]_2$
	3,8697	3	4	$5d'[5/2]_3 \rightarrow 6[illegible]'[3/2]_2$
	3,8950	4	1	$5d\ [7/2]_3 \rightarrow 6p\ [5/2]_3$
	3,9966	4	5	$5d\ [1/2]_0 \rightarrow 6p\ [1/2]_1$
	4,1527	4	0	$5d'[5/2]_2 \rightarrow 7p\ [3/2]_1$
	4,5393	4	0	$5d\ [3/2]_2 \rightarrow 6p\ [5/2]_2$
	4,6109	4	0	$5d'[3/2]_2 \rightarrow 6p'[1/2]_1$
5,025	5,0244	3	0	$5d'[5/2]_2 \rightarrow 6p'[3/2]_2$

TABLEAU 7 (suite)

	5,3566	4	5	5d $[1/2]_1 \rightarrow$ 6p $[5/2]_2$
	5,5754	5	5	5d $[7/2]_4 \rightarrow$ 6p $[5/2]_3$
5,604	5,6035	3	0	7d $[7/2]_3 \rightarrow$ 4f $[9/2]_4$
6,312	6,3121	3	0	7d $[7/2]_4 \rightarrow$ 4f $[9/2]_5$
	6,3155			7d $[7/2]_4 \rightarrow$ 4f $[9/2]_4$
	7,3167	4	5	5d $[3/2]_2 \rightarrow$ 6p $[3/2]_1$
	9,0065*	3	0	5d $[3/2]_2 \rightarrow$ 6p $[3/2]_2$
	11,2989	1	3	5d' $[5/2]_3 \rightarrow$ 4f $[9/2]_4$
11,492	11,4973	0	1	6d $[3/2]_1 \rightarrow$ 6p' $[3/2]_2$
11,780	11,7818	1	0	8d $[7/2]_4 \rightarrow$ 5f $[9/2]_5$
	12,9167	2	0	5d $[1/2]_1 \rightarrow$ 6p $[3/2]_2$

* Cette raie, qui possède un gain élevé, présente une intensité relativement faible à cause de l'absorption par les fenêtres en fluorine.

On observe pour le xénon un nombre assez élevé de transitions laser intenses, particulièrement dans le groupe 5d - 6p . Or les niveaux de la configurations 5d n'interviennent pratiquement pas dans des transitions du domaine visible. Ces transitions laser intenses permettent donc d'envisager la mesure de grandeurs caractéristiques dans les configurations 5d et 6p , par exemple de déplacement isotopique structure hyperfine.

Nous avons observé une forte amplification sur un seul parcours du tube pour les raies 3,50µ , 5,57µ et 9,00µ ; cette propriété est souvent appelée "superradiance", elle se manifeste aussi dans le néon pour la raie 3,3922µ.

Remarque :

Le xénon s'adsorbe facilement sur les parois du tube et sur les électrodes,

un pompage même assez énergique, en laisse subsister des traces difficiles à éliminer complètement. Une décharge établie ensuite avec un autre gaz, excite encore un bon nombre de raies laser du xénon de façon intense. Cette pollution devient gênante lorsqu'on veut étudier successivement divers isotopes très purs du xénon. Dans ce cas, la meilleure solution consiste à changer de tube lorsqu'on change d'isotope. Si cette solution est impraticable, ce qui est le cas pour un tube de grande longueur, il faut alors s'assurer aprés de nombreuses décharges dans un autre gaz facile à évacuer (néon), de l'absence d'oscillation sur les raies d'un isotope du xénon, avant d'en introduire un autre.

I - C - TRANSITIONS LASER OBSERVEES DANS D'AUTRES GAZ -

Le spectre des raies laser des différentes espèces atomiques, peu exploré à l'époque où le présent travail a été commencé, paraissait devoir faire l'objet d'une assez large investigation notamment dans le domaine infrarouge. Depuis lors, de nombreux résultats ont été obtenus dans divers laboratoires, particulièrement en ce qui concerne les transitions laser dans les vapeurs métalliques. Nous rendons compte ici des expériences qui ont été faites avec l'oxygène et l'azote, dans le grand laser, ainsi que de quelques essais éffectués en vue d'observer l'oscillation de raies émises par des vapeurs métalliques excitées dans des lampes à cathode creuse. Les expériences étant quelque peu en marge de ce qui constitue la suite de ce travail, elles ne seront décrites que très brièvement.

I - C - 1 - Transitions laser de l'oxygène atomique

Nous en avons observé 4 qui sont décrites dans le tableau 8. La mesure de leur longueur d'onde, bien qu'imprécise, permet de les classer sans ambiguité comme des transitions de l'oxygène atomique non ionisé. L'adsorption du gaz par les électrodes et les parois du tube rendent la durée de vie de la décharge assez brève, de l'ordre de quelques minutes. L'adjonction d'hélium augmente légèrement cette durée de vie, sans pour autant perturber beaucoup l'oscillation.

TABLEAU 8 - Oxygène atomique ($p \simeq 0,02 - 0,03$ torr)

$\lambda_{(mesurée)}(\mu)$	$\lambda_{(calculée)}(\mu)$	Classification
4,56	4,5615	$(^4S)4p\ ^3P_{210} \rightarrow (^4S)3d\ ^3D_{321}$
5,98	5,9800	$(^4S)4p\ ^5P_1 \rightarrow (^4S)3d\ ^5D_{210}$
6,87	6,8746	$(^2D)3s'\ ^3D_3 \rightarrow (^4S)4p\ ^3P_2$
10,4	10,4030	$(^4S)5p\ ^3P_{210} \rightarrow (^4S)4d\ ^3D_{321}$

Le spectre de l'oxygène atomique neutre est construit sur le coeur $1s^2\ 2s^2\ 2p^3$ présentant les termes ^4S, ^2D et ^2P. La classification que nous proposons (avec d'autres auteurs [21]) pour la raie $\lambda = 6,87\mu$ ne respecte pas la règle de sélection $\Delta L = 0$ sur le terme du coeur, ce qui indique un mélange du niveau $3s'\ ^3D_3$ avec des niveaux de configurations proches : $(^4S)3d$ et $(^4S)4d$.

La raie à $4,56\mu$ est d'intensité relativement forte. Parmi ces transitions laser, seule l'une d'elles ($\lambda = 6,87\mu$) avait été observée par d'autres auteurs [21] (dans des conditions d'ailleurs différentes des nôtres, avec notamment des décharges par impulsions). Une étude de la structure fine de ces raies a été tentée, mais la fugacité de la décharge n'a pas permis d'observations convenables.

Des expériences identiques ont été effectuées avec l'azote, mais l'excitation lumineuse de ce gaz dans des conditions variées de pression et de courant, n'a montré aucune oscillation dans le domaine spectral observé (entre 1μ et 8μ). Le spectre moléculaire est principalement excité mais ne montre pas non plus de transitions laser. Cependant, ces expériences ont été limitées à du gaz utilisé pur, ou mélangé avec de l'hélium, en outre l'excitation électrique est continue (des transitions laser du spectre de l'azote moléculaire et du spectre de l'azote ato-

mique ont en effet été observées, mais seulement dans des régimes de décharges par impulsions [21]

I - C - 2 - Expériences effectuées dans les vapeurs métalliques

L'intérêt suscité par la spectroscopie des raies laser, justifiait l'extension des observations aux vapeurs d'autres éléments, particulièrement aux vapeurs métalliques. De nombreuses expériences ont été décrites par divers auteurs - notamment au Laboratoire Aimé Cotton par Ph. Cahuzac [22]sur les vapeurs de terres rares et d'alcalino-terreux - et une liste déjà longue peut être dressée des transitions laser observées dans le domaine visible et l'infrarouge proche ou moyen. Il s'agit essentiellement de raies des spectres I et II de métaux ou de terres-rares. La plupart de ces expériences ont en commun les caractéristiques suivantes :

- la vapeur métallique est obtenue par chauffage dans un four.

- un gaz porteur, qui est le plus souvent un gaz rare, est utilisé pour permettre le passage de la décharge électrique et ralentirla diffusion de la vapeur vers les fenêtres.

- l'excitation est réalisée par des impulsions brèves de courant, dont les intensités de crête peuvent être très élevées (plusieurs centaines d'ampères).

L'usage d'un four restreint les investigations aux seuls éléments pour lesquels une pression de vapeur suffisante (de l'ordre de quelques 1/10e de torr) peut être obtenue à des températures pas trop élevées (T° maximale de l'ordre de 1500 °C). L'obtention de températures très élevées, par exemple dans un four à induction, n'est pas sans poser de délicats problèmes techniques. Aussi, les méthodes qui permettent de former des vapeurs métalliques dans d'autres conditions que par chauffage dans un four, paraissent-elles fort séduisantes à priori. L'excitation lumineuse dans une cathode creuse est ainsi une technique à envisager. Un gaz porteur est excité par une décharge électrique le plus souvent continue, l'ionisation partielle ainsi obtenueprovoque un bombardement ionique de la cathode et suscite une pulvérisation plus ou moins abondante du métal qui la constitue. Les atomes libres forment une vapeur qui est évidemment excitée par la décharge. Nous

avons procédé à des essais variés, tant en ce qui concerne la nature du métal, que la forme des lampes ou bien leur alimentation électrique. Nous n'avons malheureusement pas jusqu'ici, observé d'oscillation sur une raie qui puisse être attribuée au spectre d'un de ces métaux. Une raison peut en être cherchée dans le mode d'excitation électrique : en effet, pour avoir simultanément une forte pulvérisation métallique et une excitation énergique des atomes, nous avons superposé une décharge par impulsions (excitation) et une décharge continue (pulvérisation). Or cette superposition n'a pu être réalisée que dans des conditions assez instables. De plus, les résultats obtenus par ailleurs utilisent presque tous des décharges par impulsions seules, et pour beaucoup de raies l'inversion de population est purement transitoire car le niveau inférieur est à longue durée de vie (ou même métastable). Son peuplement préalable par une décharge continue peut facilement empêcher l'inversion de population.

Seules de nouvelles transitions laser appartenant aux spectres des différents gaz porteurs utilisés, ont été observées dans ces conditions particulières d'excitation (tableau 9).

TABLEAU 9

Spectre	$\lambda_{(observée)}(\mu)$	$\lambda_{(calculée)}(\mu)$	Classification
Ar I	1,27	1,2706	$3d'[1/2]1 \rightarrow 4p'[1/2]1$
Ar I	3,70	3,7014	$6s'[1/2]1 \rightarrow 5p'[1/2]1$
Kr I	1,43	1,4351	$4d'[3/2]1 \rightarrow 5p'[1/2]1$
Kr I	1,47	1,4738	$4d\ [5/2]3 \rightarrow 5p\ [5/2]3$
	3,67		xénon?
Kr I	3,77	3,7742	$7s\ [3/2]1 \rightarrow 6p\ [5/2]2$
Kr I	4,06	4,0692	$7s\ [3/2]1 \rightarrow 6p\ [3/2]1$

CHAPITRE II

ETUDES A TRES HAUTE RESOLUTION DES STRUCTURES HYPERFINES ET DEPLACEMENTS ISOTOPIQUES DES RAIES LASER INFRAROUGES DANS LES GAZ RARES

En comparaison des autres méthodes expérimentales permettant l'analyse des structures de raies laser visibles ou infrarouges, celles de la spectroscopie optique mettent en jeu des montages relativement simples qui conduisent à des mesures systématiques dans un domaine étendu de longueurs d'onde. La précision des mesures optiques, surtout dans la région infrarouge étudiée, est généralement suffisante compte tenu de la précision limitée avec laquelle on traite l'interprétation théorique; interprétation qui se trouve d'ailleurs facilitée par le grand nombre de transitions, et par suite de niveaux, sur lesquels on obtient des informations. La longue expérience acquise au Laboratoire Aimé Cotton dans le domaine de la spectrométrie interférentielle à haute résolution, a naturellement favorisé la préférence donnée à ce type de méthode. Nous avons essentiellement utilisé un étalon interférentiel de Fabry-Perot, la structure en modes serrés des raies laser n'étant pas incompatible avec un tel analyseur de radiations.

II - A - MONTAGE D'ANALYSE A HAUTE RESOLUTION AVEC UN INTERFEROMETRE FABRY-PEROT EXTERIEUR A LA CAVITE LASER -

II - A - 1 - Schéma général du montage (voir figure 2)

Le principe du montage est identique à celui du spectromètre Fabry-Perot

MOUNTAIN VIEW
BUILDING
BUILDING
BUILDING

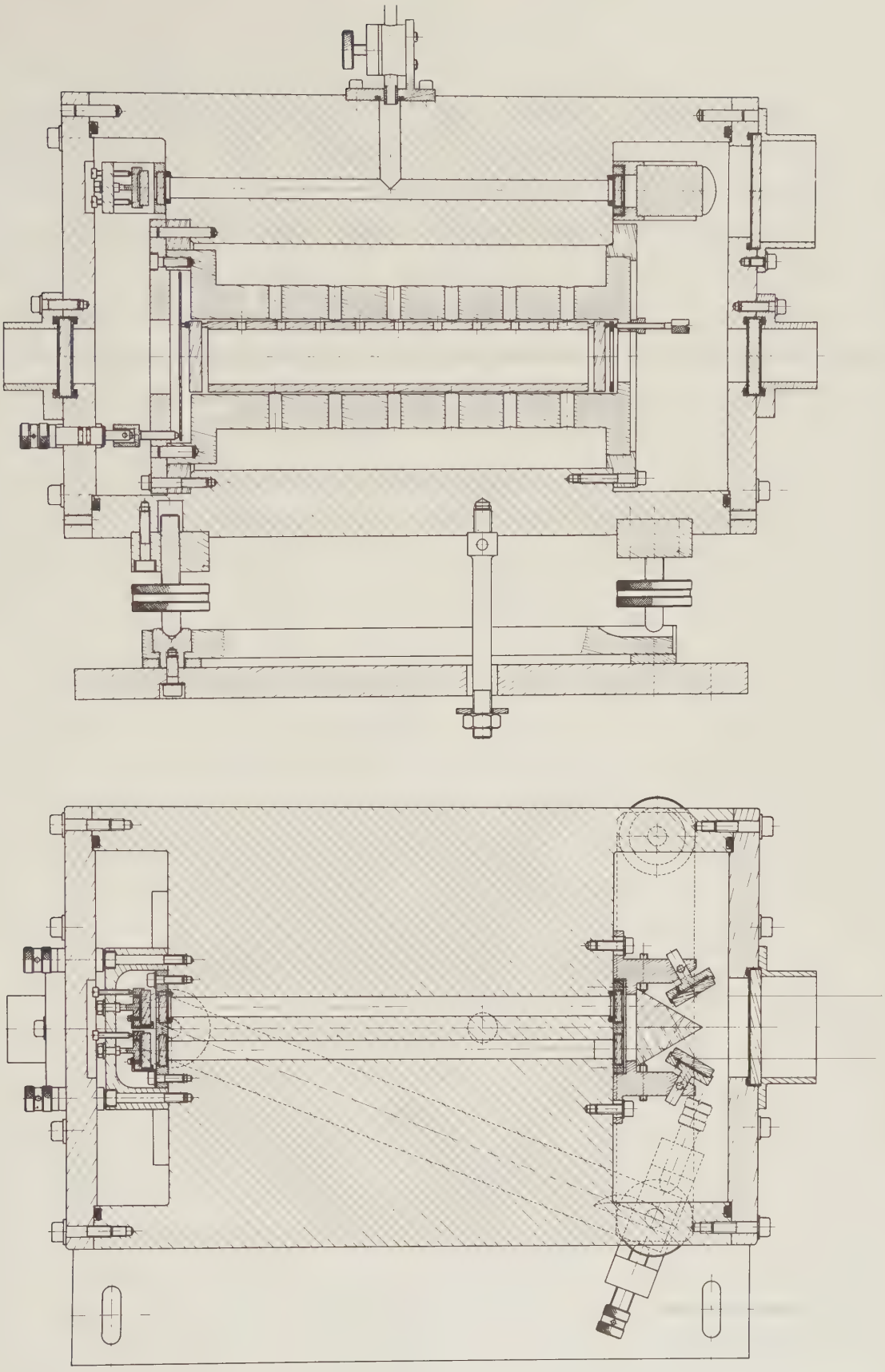


Figure 3

sont efficaces dans un domaine tel que $\Delta\sigma/\sigma$ voisin de 0,25 ; la plupart des raies observées entre 1µ et 9µ ont ainsi pu être étudiées au moyen de 6 paires de lames seulement. L'étalon est à cales fixes en invar. Afin d'adapter la résolution aux diverses structures étudiées, et pour lever les ambiguités d'ordres, plusieurs longueurs de cales ont été utilisées comprises entre 20 et 200mm . L'interféromètre est placé dans une enceinte à l'intérieur de laquelle on peut faire le vide. Le balayage de plusieurs ordres par modification régulière de l'épaisseur optique de l'étalon, est assuré par variation de la pression à l'intérieur de cette enceinte. Le plus simple consiste à y laisser entrer l'air à partir de la pression nulle, au moyen d'une fuite linéaire (en fonction du temps) constituée par une pompe à doigts (actionnée par un moteur synchrone). Si l'on prend pour test de la linéarité , la comparaison de quelques intervalles entre-ordres successifs (ou "empiétants") à leur moyenne arithmétique, l'écart relatif maximum obtenu avec notre dispositif est d'environ 1% à 2% dans l'intervalle 0 - 0,8 atmosphère (cet écart comprend en réalité un terme purement aléatoire et un terme correspondant à une augmentation systématique des intervalles mesurés lorsque la pression croit à l'intérieur de l'enceinte). Cet écart a pu être réduit sensiblement au prix d'une complication mineure (pompe à doigts à 2 étages). On pourrait, s'il en était besoin, utiliser un test de linéarité plus fin consistant à comparer les intervalles entre ordres étalonnés avec des franges d'un interféromètre de Milchelson (voir II-A-3). Ceci suppose une température suffisamment constante, et amène à distinguer entre les variations linéaires de l'intervalle entre ordres et les fluctuations de ces mêmes intervalles.

Le réglage de l'interféromètre sur les anneaux à l'infini, présente quelques difficultés dues pour une part à ce que les épaisseurs d'étalon utilisées imposent une longueur de cohérence assez grande pour la radiation visible avec laquelle on fait ce réglage, et d'autre part à ce que les couches multidiélectriques déposées donnent lieu à une réflexion sélective qui ne correspond pas toujours au domaine du visible. Donc, quelle que soit la raie visible utilisée pour ce réglage, on ne voit jamais que quelques anneaux (2 ou 3) plus ou moins contrastés, et d'autant plus serrés que les épaisseurs des cales sont plus grandes. Une solution pratique consiste à éclairer l'interféromètre à travers un diffusant, avec la raie rouge d'un laser à He - Ne (oscillant sur un petit nombre de modes); avec un peu

d'habitude on peut voir directement les anneaux avec des épaisseurs d'étalon allant jusqu'à 120 mm. Au delà de ces épaisseurs, les anneaux deviennent trop serrés pour permettre un réglage à l'oeil nu; une lunette de visée est rendu nécessaire. On peut enfin améliorer considérablement le contraste en utilisant des lames sur lesquelles on a disposé une couche métallique sur une couronne périphérique à la partie utile.

Le réglage de l'orientation du Fabry-Perot ne présente pas de difficulté particulière, il se fait par autocollimation, au moyen d'un peti diaphragme d'entrée; on l'améliore ensuite en s'aidant directement du signal étudié.

II - A - 3 - Etalonnage de l'intervalle entre ordres

Les intervalles entre les composantes d'une structure s'obtiennent par moyennes arithmétiques des mesures faites avec plusieurs enregistrements, en utilisant pour chacun d'eux un assez grand nombre d'ordres consécutifs. L'incertitude est évaluée par l'écart quadratique moyen correspondant. Afin d'augmenter la précision en éliminant les petites erreurs accidentelles dues à des défauts de linéarité, un dispositif d'étalonnage a été adapté au montage (cf. figure 3). Ce dispositif est constitué par un réfractomètre interférentiel du type de Michelson [25]. L'un des bras de l'interféromètre est hermétiquement clos, la pression y est ainsi maintenue fixe à une valeur très proche de la pression atmosphérique. L'autre bras est dans l'enceinte qui contient l'étalon de Fabry-Perot, et par conséquent est à la même pression que celle-ci à tout instant. L'interféromètre de Michelson qui fonctionne au voisinage de la différence de marche nulle, est réglé sur les anneaux à l'infini, et est éclairé par la raie verte du mercure ($\lambda_M = 5461$ Å) . Toute variation de pression dans l'enceinte correspond à une variation d'indice et entraîne une variation du signal (en fonction de n) du Michelson, selon une loi sinusoidale. Si dn' est la variation d'indice qui entraîne le défilement d'un ordre du Michelson, on a : $dn' = \lambda_M/2\ell$ (ℓ est la longueur du bras). Le défilement d'un intervalle entre ordres du Fabry-Perot pour une longueur d'onde λ_{FP} correspond à une variation dn telle que $dn = \lambda_{FP}/2e$ (e : épaisseur de l'étalon) . Le nombre d'anneaux du Michelson qui défilent durant le balayage d'un intervalle entre ordres du Fabry-

Perot est donc $m = \ell/e \cdot \lambda_{FP}/\lambda_M$. (Ainsi par exemple pour ℓ = 20cm , e = 10cm, $\lambda_{FP} = 3{,}5\mu$ et $\lambda_M = 0{,}5461\mu$ on a $m \simeq 13$ franges). On obtient ainsi un étalonnage en franges du Michelson qui élimine pratiquement les effets des défauts de linéarité du balayage et permet d'éffectuer des enregistrements sur un intervalle de pression de près d'une atmosphère (en particulier la température de l'air à l'intérieur de la cloche n'intervient pas directement : elle peut n'être ni constante ni très homogène, l'essentiel est que la température du spacer ne subisse que des variations très lentes).

II - A - 4 - Le monochromateur

Il est constitué par un petit spectromètre à faible résolution comprenant un réseau à 50,88 tr/mm (ℓ = 34mm, h = 25mm) dont l'angle de miroitement est de 27°15 à $\lambda = 18\mu$ dans le 1er ordre. Le montage, du type Ebert-Fastie, utilise un miroir de longueur focale 300mm. Les fentes d'entrée et de sortie sont identiques, de largeurs fixes, choisies parmi 4 jeux : 2mm, 1mm, 0,5mm et 0,3mm. L'ouverture du monochromateur correspond à F/10 ; la limite de résolution moyenne obtenue avec la fente de 0,3mm est de 30Å vers 3μ . L'exploration du spectre, obtenue par rotation du réseau, s'éffectue manuellement au moyen d'une vis micrométrique graduée.

II - B - MESURES DES STRUCTURES HYPERFINES

Nos mesures ont été éffectuées sur les transitions laser des isotopes impairs du xénon et du néon. Les spin nucléaires de ces divers isotopes sont I = 1/2 pour le xénon - 129 et I = 3/2 pour le xénon - 131 et le néon - 21 . Leur valeur relivement faible conduit à des structures assez simples. Divers effets secondaires viennent cependant compliquer quelque peu la situation. Le premier de ces effets est dû à la présence d'autres isotopes dans les échantillons utilisés, particulièrement des isotopes pairs qui peuvent faire apparaître des composantes parasites qu'il faut identifier sans ambiguité. D'autres effets sont liés à la nature de l'émission laser : l'oscillation présente des phénomènes de seuil et

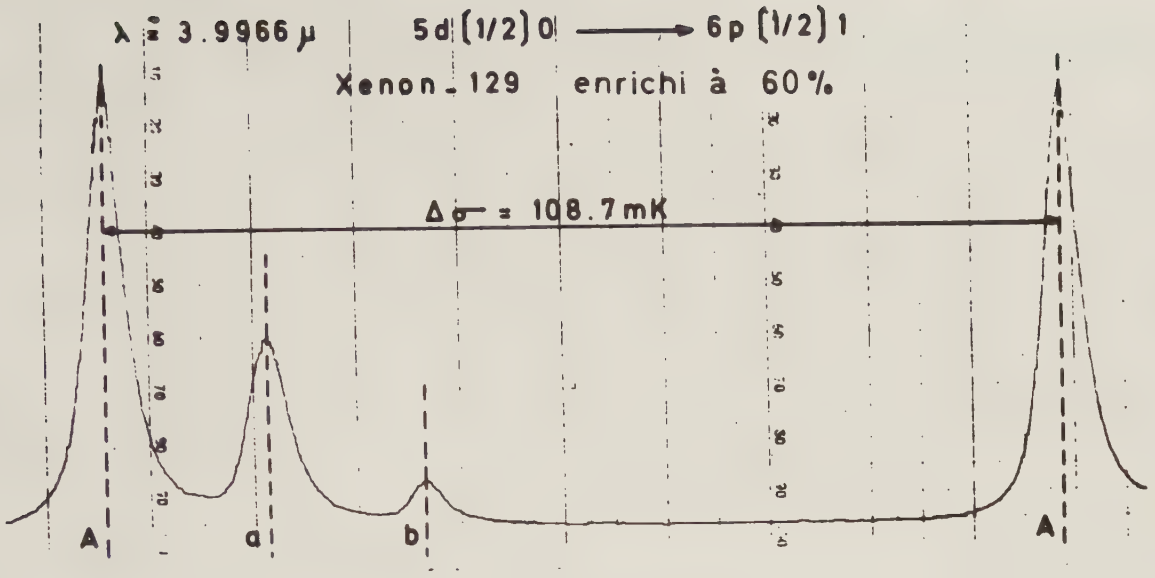
de saturation dépendant d'un grand nombre de paramètres difficiles à contrôler séparément. En outre, les effets de compétition avec d'autres raies, ou avec d'autres composantes hyperfines, jouent un rôle important. Un exemple donné sur la figure 4 montre le résultat d'une étude limitée aux variations des conditions de la décharge, essentiellement de la pression et du courant. Il met en évidence de fortes variations relatives d'intensité des différentes composantes de la même structure; il est manifeste que les règles classiques sur les intensités dans les structures hyperfines ne sont plus respectées. De même l'existence d'un seuil d'oscillation fixé par les pertes interdit pratiquement l'apparition d'un effet laser sur les composantes dont l'intensité serait faible s'il s'agissait d'une émission spontanée, et ces composantes n'apparaissent donc généralement pas. Les niveaux supérieurs de ces transitions, communs à des transitions intenses, sont fortement dépeuplés par celles-ci; ou bien, au contraire, les niveaux inférieurs, communs à des transitions intenses, sont fortement peuplés par celles-ci. Dans ces conditions, l'utilisation d'un dispositif réfléchissant extrèmement sélectif en guise de miroir de cavité, peut permettre de s'affranchir au moins partiellement des éffets gênants de compétitions entre composantes à niveaux communs. Cette question, et la solution que nous y avons apportée, seront éxaminées plus en détail dans la partie II-C .

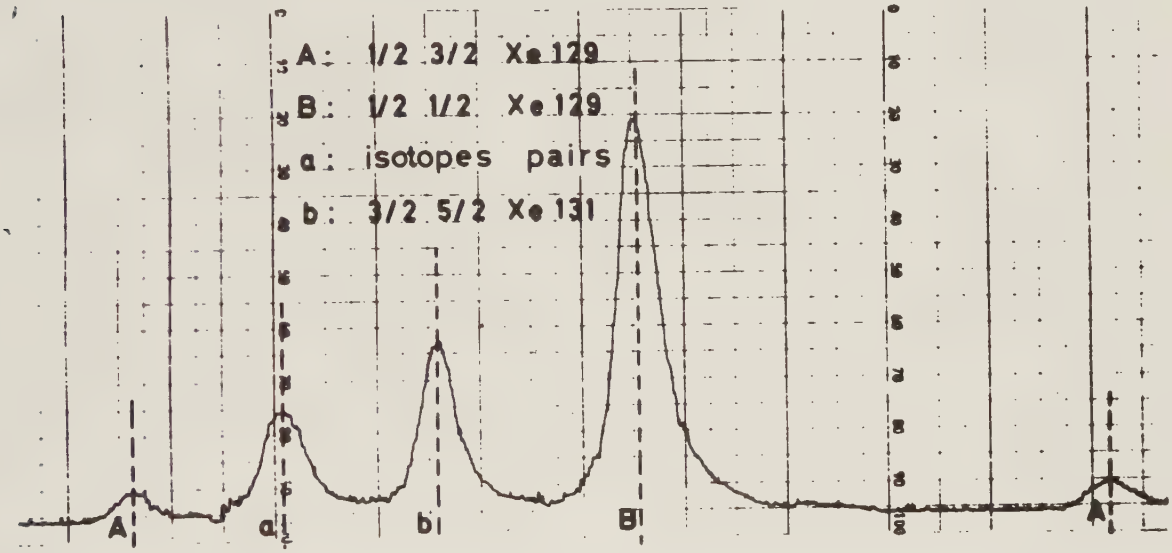
Des résultats théoriques très généraux sur la structure hyperfine atomique sont indispensables pour interprèter les mesures et caractériser les niveaux; essentiellement, les effets hyperfins décomposent un niveau (αJ) en sous-niveaux hyperfins (αJF) dont les déplacements sont donnés par la formule de Casimir [26] (cf. III-A-2-) :

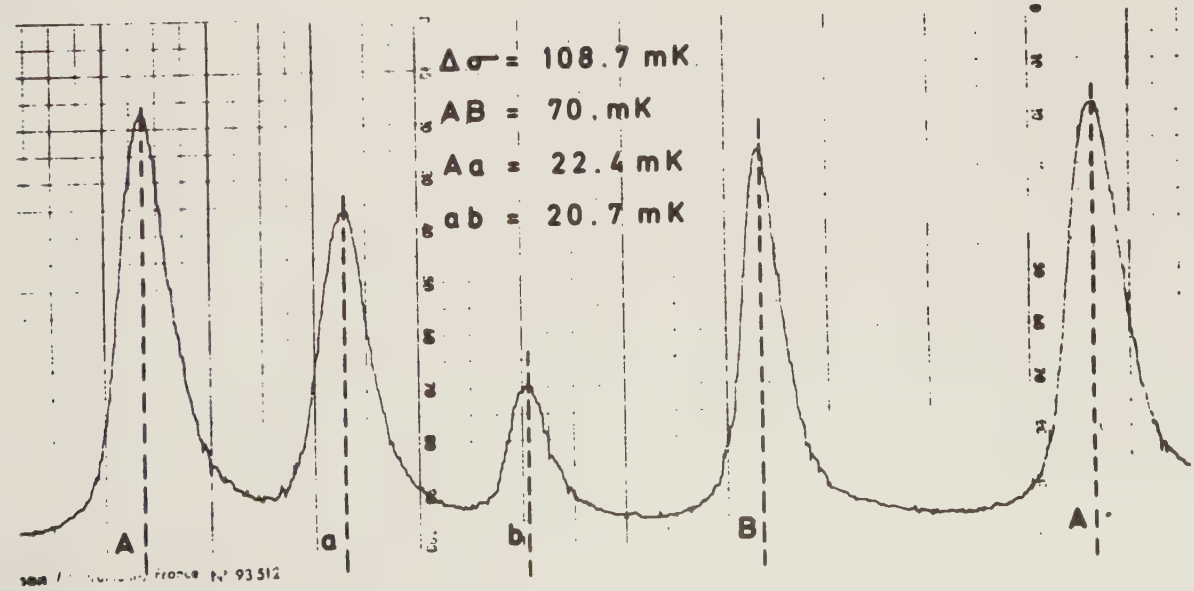
$$\Delta W_{\alpha JF} = \frac{1}{2} A_{\alpha J} C_F + B_{\alpha J} \cdot \frac{3C_F (C_F + 1) - 4I (I + 1) J (J + 1)}{8I (2I - 1) J (2J - 1)}$$

(le terme quadrupolaire n'existe que si $I,J \geqslant 1$) dans laquelle on a :

- I : spin nucléaire de l'atome
- J : moment angulaire électronique total


λ = 3.9966 μ
5d (1/2) 0 ⟶ 6p (1/2) 1
Xenon - 129 enrichi à 60 %
Δσ = 108.7 mK
A
a
b
A


A : 1/2 3/2 Xe 129
B : 1/2 1/2 Xe 129
a : isotopes pairs
b : 3/2 5/2 Xe 131
A
a
b
B
A


Δσ = 108.7 mK
AB = 70. mK
Aa = 22.4 mK
ab = 20.7 mK
A
a
b
B
A

- $C_F = F(F + 1) - I(I + 1) - J(I + 1)$

F étant le nombre quantique correspondant au nouveau moment angulaire total, défini par $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$.

- $A_{\alpha J}$: constante de structure magnétique du niveau (αJ)

- $B_{\alpha J}$: constante de structure quadrupolaire du niveau (αJ).

En outre, la règle de sélection relative au moment angulaire total, est pour la structure hyperfine : $\Delta F = 0, \pm 1$ avec $0 \not\leftrightarrow 0$. L'écart entre les sous-niveaux hyperfins F et F - 1 est donc, d'après la formule de Casimir, pour la partie magnétique : $A_{\alpha J} \cdot F$, et pour la partie électrique :

$$B_{\alpha J} \cdot \frac{3\left[C_F(C_F + 1) - C_{F-1}(C_{F-1} + 1)\right]}{8I(2I - 1)\, J(2J - 1)}$$

II - B - 1 - Xénon 129 [60]

a) - Mélanges isotopiques

Nous avons successivement travaillé, pour étudier cet isotope, avec 3 mélanges isotopiques : le xénon naturel, un échantillon enrichi en isotope 129 (disponible commercialement au Mound Laboratory de la Monsanto Research Corporation), enfin un mélange très hautement enrichi en isotope 129 qui a été préparé à notre intention par le Centre de Spectrométrie de Masse [27] (CNRS I -Orsay).

Le tableau 10 donne les abondances isotopiques correspondantes à ces 3 mélanges.

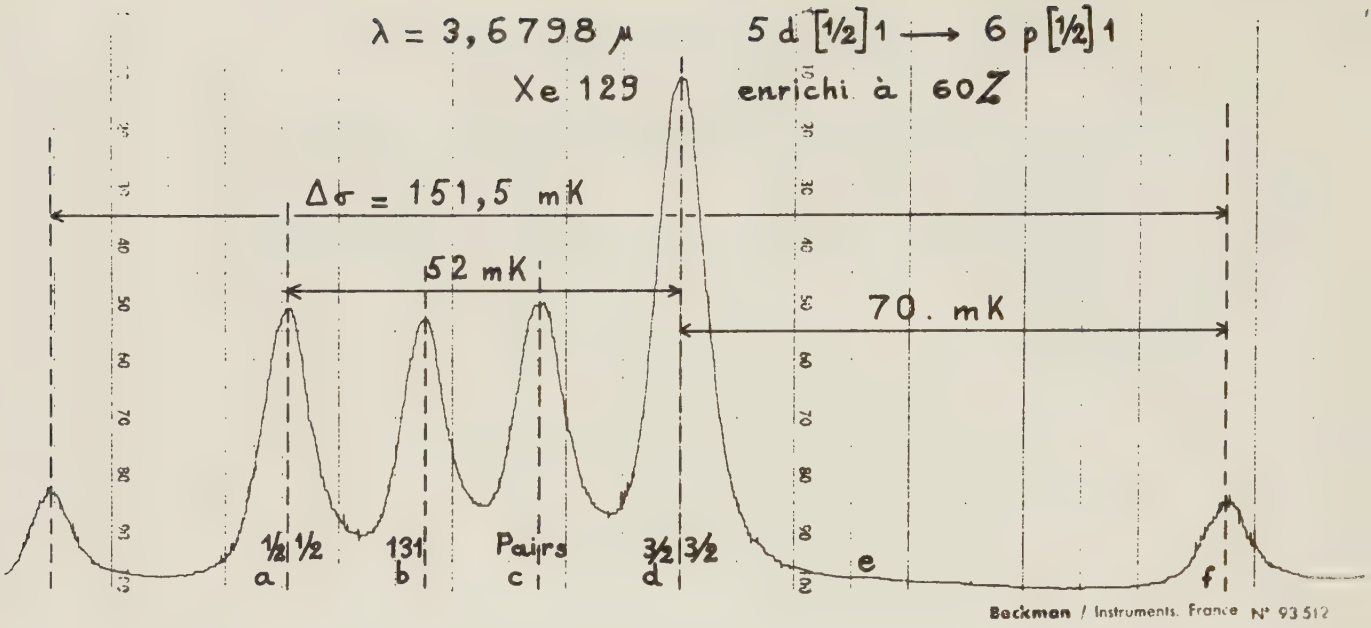
TABLEAU 10 - Abondances en %

Nombre de masse	Naturel 1	Monsanto 2	Haute pureté 3
124	0,096	0,95	
126	0,09	0,84	
128	1,92	10,21	
129	26,44	52,53	98,4
130	4,08	5,54	0,1
131	21,18	15,9	0,35
132	26,89	12,26	0,67
134	10,44	1,35	0,23
136	8,87	0,45	0,19

b)-Ecart mesurés

L'isotope de nombre de masse 129 du xénon possède un spin nucléaire I = 1/2, donc pas de moment quadrupolaire; les niveaux (de $J \neq 0$) se décomposent en 2 sous niveaux hyperfins, et dans ce cas, une transition peut présenter une structure à 2, 3 ou 4 composantes suivant la valeur des J des niveaux. Seules 2 composantes sont intenses en émission spontanée : ce sont le plus souvent ces composantes qui apparaissent dans les structures des raies laser observées. En conséquence, une raie ne donne lieu généralement qu'à la mesure d'un seul écart et ne saurait dés lors, permettre d'accéder aux constantes des niveaux (sauf si l'un d'eux est de J= 0), il est nécessaire de posséder des mesures sur de nombreuses raies ayant des niveaux communs. Ce qui est le cas pour les raies laser infrarouges du xénon.

La plupart des enregistrements ont été éffectués avec le mélange 2 enrichi à 52,53% , aussi, une composante groupant l'ensemble des isotopes pairs (31,5%) apparait systématiquement de même qu'une ou quelquefois 2 composantes supplémentaires qui ne peuvent alors être attribuées qu'à l'isotope de nombre de masse


λ = 3,6798 μ
5 d [1/2] 1 ⟶ 6 p [1/2] 1
Xe 129 enrichi à 60 %
Δσ = 151,5 mK
52 mK
70. mK
1/2 1/2
131
Pairs
3/2 3/2
a
b
c
d
e
f
Beckman / Instruments. France N° 93.512

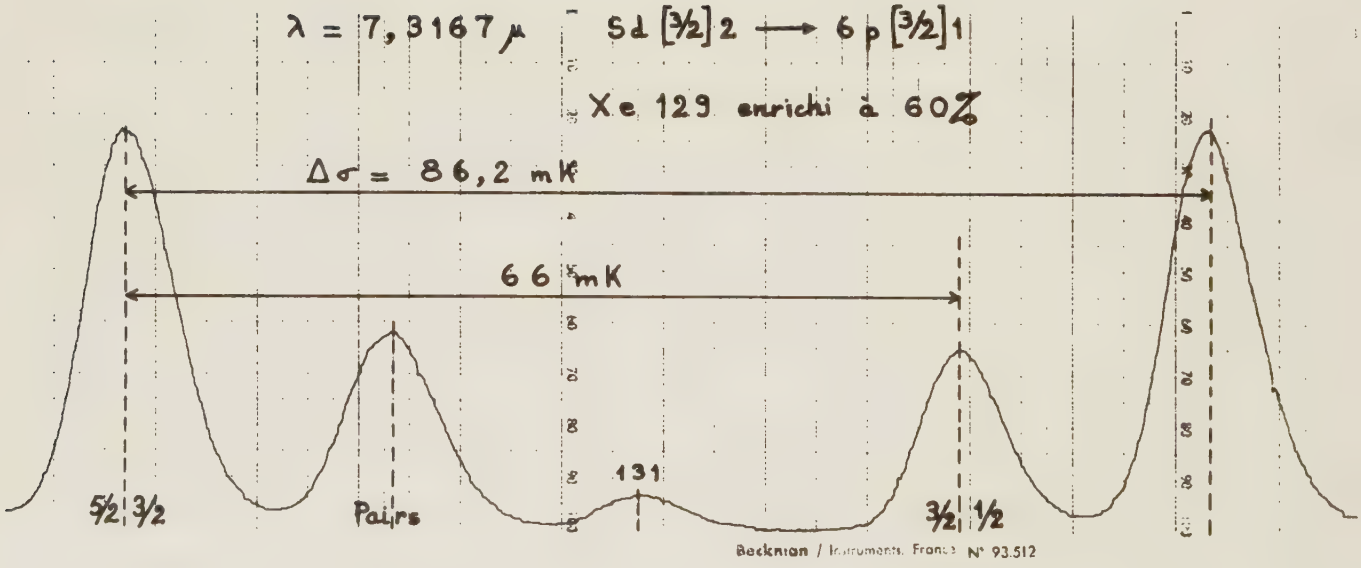

λ = 7,3167 μ
5d [3/2] 2 ⟶ 6 p [3/2] 1
Xe 129 enrichi à 60 %
Δσ = 86,2 mK
66 mK
131
5/2 3/2
Pairs
3/2 1/2
Beckman / Instruments. France N° 93.512

Figure 5

131 (16%). Dans de telles conditions, l'identification des composantes enregistrées peut n'être pas évidente pour quelques transitions. Cependant, un ordre de grandeur des intervalles attendus peut être facilement calculé, ce qui constitue un guide éfficace dans l'identification. Par ailleurs, dans le mélange utilisé le centre de gravité des isotopes pairs est pratiquement confondu avec l'isotope 130; l'écart entre la composante attribuée aux isotopes pairs et le centre de gravité calculé de la structure de l'isotope 129 doit correspondre à l'ordre de grandeur de l'écart isotopique 129-130 dont on peut avoir une idée grâce à des études faites par d'autres auteurs, notamment R. Vetter [28]. Cette évaluation peut constituer une bonne justification à postériori des identifications. Dans les rares cas douteux, le recours à l'échantillon très enrichi en isotope 129 , a été déterminant. Des exemples d'enregistrement interprétés sont donnés figure 5 .

TABLEAU 11 - Intervalles mesurés

$\lambda_{(\mu)}$	Ecarts	Mesures(mK)	Epaisseur F.P. (mm)	Echantillon
3,99	1/2 3/2 - 1/2 1/2	70,0 (1,0)	46	2
5d $[1/2]_0 \rightarrow$ 6p $[1/2]_1$		70,5 (0,5)	38	2
3,10	7/2 5/2 - 5/2 3/2	19,6 (0,3)	128	3
5d $[5/2]_3 \rightarrow$ 6p $[3/2]_2$		19,6 (0,3)	108	3
3,27	5/2 3/2 - 3/2 1/2	69,9 (0,8)	38	2
5d $[3/2]_2 \rightarrow$ 6p $[1/2]_1$		69,6 (0,7)	46	2
		70,9 (0,9)	33	3
3,50	7/2 5/2 - 5/2 3/2	11,3 (0,2)	128	3
5d $[7/2]_3 \rightarrow$ 6p $[5/2]_2$		11,3 (0,4)	100	2

TABLEAU 11 - (suite)

3,67 5d [1/2]1 →6p [1/2]1	3/2 3/2 - 1/2 1/2	51,1 (0,8) 51,5 (0,6) 51,2 (0,6)	33 38 33	2 2 3
	3/2 3/2 - 3/2 1/2	70,0 (0,7) 70,6 (1,0)	33 38	2 2
3,86 5d'[5/2]3 → 6p'[3/2]2	7/2 5/2 - 5/2 3/2	41,9 (0,3) 41,4$_5$ (0,6)	100 46	2 2
4,15 5d'[5/2]2 → 7p [3/2]1	5/2 3/2 - 3/2 1/2	87,6 (0,4) 87,9 (0,9)	38 46	2 2
4,54 5d [3/2]2 → 6p [5/2]2	5/2 5/2 - 3/2 3/2	112,8 (0,3) 112,8 (0,8)	53 58	2 2
5,57 5d [7/2]4 → 6p [5/2]3	9/2 7/2 - 7/2 5/2	14,0 (0,5) 14,1$_5$ (0,3)	100 128	2 3
7,31 5d [3/2]2 → 6p [3/2]1	5/2 3/2 - 3/2 1/2	65,8 (0,5) 66,1 (0,8)	38 58	2 2
9,00 5d [3/2]2 → 6p [3/2]2	5/2 5/2 - 3/2 3/2	75,0 (0,7)	38	3
2,62 5d [5/2]2 → 6p [5/2]2	5/2 5/2 - 3/2 3/2	43,9 (0,9)	58	2

Pour chaque raie nous avons éffectué plusieurs enregistrements avec le même intervalle entre ordres, mais dans des conditions de réglage ou d'excitation légèrement différentes. A chacun d'eux correspond une mesure et un écart quadratique moyen. La valeur définitive est la moyenne de ces mesures, et l'incertitude (notée entre parenthèses) correspond au plus grand de ces écarts quadratiques moyens (elle est toujours supérieure à l'écart entre les diverses moyennes partielles).

c) - Constantes de structure hyperfine magnétique des niveaux

A partir des mesures précédentes, il est possible de calculer les constantes de la structure magnétique $A_{\alpha J}$ de plusieurs niveaux, en utilisant la règle de Landé. La raie $\lambda = 3{,}99\mu$ ($5d[1/2]0 \rightarrow 6p[1/2]1$) permet la détermination de la constante du niveau $6p[1/2]1$. La raie $\lambda = 3{,}27\mu$ ($5d[3/2]2 \rightarrow 6p[1/2]1$) , ayant même niveau inférieur que la précédente, permet d'atteindre la constante du niveau $5d[3/2]2$; l'interprétation des structures enregistrées pour cette raie conduit à une valeur nulle (à $\pm$ 0,5mK) pour la constante de ce niveau. Un enregistrement de la structure en émission spontanée éffectué sur cette raie avec un spectromètre par transformation de Fourier à très haute résolution par J. Pinard [3], a permis de confirmer cette interprétation, qui est en bon accord avec les intensités observées. A partir de ces valeurs on déduit les constantes des niveaux $6p[5/2]2$ ($\lambda = 4{,}54$) , $6p[3/2]1$ ($\lambda = 7{,}31$) et $6p[3/2]2$ ($\lambda = 9{,}00$), puis celles des niveaux $5d[5/2]2$ ($\lambda = 2{,}62$) , $5d[7/2]3$ ($\lambda = 3{,}50$ et $\lambda = 3{,}10$), $5d[1/2]1$ ($\lambda = 3{,}67$) . Enfin, en utilisant pour les niveaux $6p[5/2]3$ et $6p'[3/2]1$ les constantes déterminées par A. Bohr et coll. [29], ainsi que pour le niveau $7p[3/2]1$ la constante déterminée récemment par D. Jackson et M. Coulombe [30], on déduit encore de nos mesures les constantes des niveaux $5d[7/2]4$ ($\lambda = 5{,}57$) , $5d'[5/2]3$ ($\lambda = 3{,}86$) et $5d'[5/2]2$ ($\lambda = 4{,}15$) . Les valeurs des constantes $A_{\alpha J}$ ainsi déterminées, sont données dans le tableau 12 et comparées aux valeurs déterminées par d'autres auteurs.

TABLEAU 12

Niveaux	$A_{\alpha J}$ nos mesures	autres mesures
$6p[1/2]_1$	- 46,8 ± 0,5	- 46 [29]
$6p[5/2]_2$	- 45,1 ± 0,5	- 44,8 "
$6p[5/2]_3$		- 28,97 "
$6p[3/2]_1$	- 44,0 ± 1,2	- 42,67 "
$6p[3/2]_2$	- 30,0 ± 0,8	- 29,32 "
$6p[3/2]_1$		-149,1 "
$7p[3/2]_1$		- 90,9 [30]
$5d[1/2]_1$	- 80,7 ± 1	
$5d[7/2]_4$	- 19,4 ±	
$5d[7/2]_3$	- 29,0 ± 0,5	
$5d[3/2]_2$	0 ± 0,5	
$5d[5/2]_2$	- 27,6 ± 0,8	- 27,65 [31]
$5d[5/2]_3$	- 15,8 ± 0,5	
$5d'[5/2]_2$	- 89,6	
$5d'[5/2]_3$	- 57,2	

Les incertitudes n'ont été données que pour les valeurs que nous avons pu déduire de nos seules mesures. Les valeurs que nous avons déterminées pour 4 niveaux 6p et 1 niveau 5d sont en bon accord avec celles déterminées par d'autres auteurs.

Des enregistrements éffectués sur 8 autres raies n'ont pu être exploités, les structures ne montrent en effet, qu'une ou deux composantes seulement.

II - B - 2 - Xénon 131 -

a)-Mélange isotopique

Nous n'avons travaillé pour cet isotope, qu'avec une petite quantité de xénon hautement enrichi en isotope 131, provenant aussi du grand séparateur du Centre de Spectrométrie de masse [27]. La composition isotopique du mélange est indiquée dans le tableau 13 .

TABLEAU 13

Nombre de masse	Abondance en %
129	0,541
130	0,112
131	98,05
132	0,734
134	0,297
136	0,245

b)-Intervalles mesurés

L'isotope de nombre de masse 131 du xénon possède un spin nucléaire $I = 3/2$ et présente un moment quadrupolaire faible ($Q \simeq 0,12$ barns) [29][32]. Les structures peuvent être plus compliquées que dans le cas de l'isotope 129, et l'identification des composantes assez difficile. La simplification apportée par l'utilisation d'un échantillon très enrichi est indispensable. De plus, le rapport des moments magnétiques nucléaires des 2 isotopes 129 et 131 ayant été mesuré avec une grande précision [33], la structure magnétique de l'isotope 131 peut être déduite de celle de l'isotope 129 (l'anomalie de structure hyperfine étant supposée négligeable [32]). La présence dans le gaz d'une très faible quantité de l'isotope 129 suffit pour qu'apparaissent une, ou les 2 composantes les plus intenses de cet

isotope (cf. I-B-7), ce qui ajoute encore à la confusion dans l'identification des composantes. Il reste que seules les raies présentant des structures assez simples et bien résolues donnent lieu à des mesures : au total une douzaine de raies ont été étudiées, mais 7 d'entre elles seulement ont pu être exploitées. Les résultats sont contenus dans le tableau 14.

TABLEAU 14

$\lambda(\mu)$	Ecarts	Mesures (mK)	Epaisseurs FP (mm)
3,99 $5d[1/2]_0 \rightarrow 6p[1/2]_1$	3/2 5/2 - 3/2 3/2 3/2 5/2 - 3/2 1/2	36,3 54,9	58
3,36 $5d[5/2] \rightarrow 6p[3/2]_1$	7/2 5/2 - 3/2 3/2	17,1	58
3,27 $5d[3/2]_2 \rightarrow 6p[1/2]_1$	7/2 5/2 - 5/2 3/2 5/2 3/2 - 3/2 1/2	37,7 54,2	58
3,67 $5d[1/2]_1 \rightarrow 6p[1/2]_1$	5/2 5/2 - 3/2 5/2 5/2 5/2 - 5/2 3/2	58,4 37,7	58 - 38
4,54 $5d[5/2]_2 \rightarrow 6p[5/2]_2$	7/2 7/2 - 5/2 5/2	56,2	38 - 100
7,31 $5d[3/2]_2 \rightarrow 6p[3/2]_1$	7/2 5/2 - 5/2 3/2	35,3	58 - 100
9,00 $5d[3/2]_2 \rightarrow 6p[3/2]_2$	7/2 5/2 - 5/2 3/2	34,4	58

La précision est de l'ordre de 0,2 mK (écart quadratique moyen).

Dans le cas des raies intenses $\lambda = 2{,}62\mu$, $\lambda = 3{,}50\mu$, $\lambda = 4{,}15\mu$ et $\lambda = 5{,}57\mu$, les enregistrements que nous avons éffectués montrent des structures assez serrées à nombreuses composantes, dont plusieurs sont dues à d'autres isotopes; l'identification trop incertaine des composantes rend les mesures sur ces raies difficiles à exploiter.

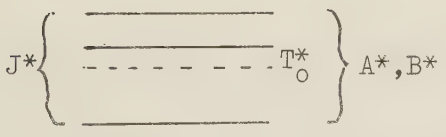
c) - Constantes de structures hyperfine quadrupolaire des niveaux

La structure magnétique du xénon 131 se déduisant simplement de celle du xénon 129, les mesures précédentes permettent d'accéder aux constantes quadrupolaires $B_{\alpha J}$ de plusieurs niveaux. Pour la raie $\lambda = 3{,}99$ ($5d[1/2]0 \rightarrow 6p[1/2]1$) , on dispose des valeurs des 2 intervalles; le niveau supérieur n'étant pas décomposé ($J = 0$) , il est facile de calculer A et B du niveau inférieur.

Par ailleurs, plusieurs transitions ont en commun le niveau $5d[3/2]2$ pour lequel on a trouvé $A = 0$ (cf. II-B-1) (bien que fortuit, ce résultat s'est révélé très utile); ce sont les raies $\lambda = 3{,}27\mu$, $\lambda = 4{,}54\mu$, $\lambda = 7{,}31\mu$ et $\lambda = 9{,}00\mu$. La constante quadrupolaire de ce niveau n'a pas de raison d'être nulle, on attend donc pour celui ci de petits écarts entre les sous-niveaux hyperfins. Cette circonstance complique l'interprétation des structures des raies précedentes. En effet , certains satellites peuvent se trouver très proches d'une composante intense, et n'être pas résolus si l'intervalle est inférieur à la largeur Doppler. Dans ce cas, pour les modes dont les fréquences se situent dans le domaine occupé par l'un de ces satellites, on ne peut distinguer la contribution due au satellite de celle due à la raie intense. Si l'oscillation est très forte, on doit s'attendre à obtenir un profil reproduisant grossièrement celui qui correspond à l'émission spontanée. Il s'agit là d'une hypothèse, que la cohérence dans l'interprétation des mesures permet seule de justifier, à postériori. La largeur Doppler de la raie $\lambda = 3{,}27\mu$ étant suffisante ($\Delta\sigma_D = 3{,}75$ mK , et on attend des écarts de l'ordre de 2 à 3 mK pour le niveau $5d[3/2]2$), nous avons tenu compte d'une perturbation dans la structure de cette raie, selon une méthode décrite par P.Brix [34].

Cette méthode, simple et très générale, interprète des structures hyperfines lorsque la décomposition d'un des niveaux d'une transition est faible comparée à

celle de l'autre niveau. On peut en donner un bref aperçu en s'aidant d'un schéma (figure 6). T_o^* et T_o sont les centres de gravité des niveaux supérieur et inférieur. A' et B' des constantes de structure apparentes, tirées de la structure enregistrée, en supposant nulle la décomposition d'un des 2 niveaux (par ex. ici le niveau supérieur). Le nombre d'onde correspondant à une composante est donné par :



$$\sigma = \sigma_o + \frac{A'C_F}{2} + B'\left[C_F(C_F + 1) - \frac{4}{3} I(I+1)\, J(J+1)\right]$$

où $\sigma_o = | T_o - T_o^* |$

(les constantes quadrupolaires des niveaux correspondent à celles de la formule de Casimir mais sont ici multipliées par le facteur $\frac{3}{8I(2I-1)\, J(2J-1)}$)

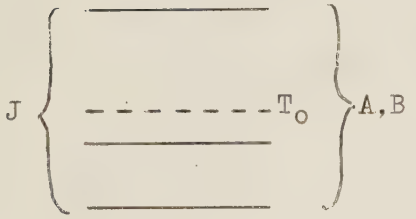


Fig. 6

On a $A' = [-1] \cdot (A - \alpha A^*)$

$B' = [-1] \cdot (B - \beta B^*)$

α et β ne dépendent que de J et sont donnés dans le tableau 15. Le facteur $[-1]$ n'intervient que si $T_o < T_o^*$.

TABLEAU 15

	α	β
$J^* = J + 1$	$(J+2)/(J+1)$	$(2J^2 + 9J + 10)/(2J + 3)(J + 1)$
$J^* = J$	$[J(J+1) - 1]/J(J+1)$	$[J(J + 1) - 3]/J(J + 1)$
$J^* = J - 1$	$(J-1)/J$	$(J - 1)(2J - 3)\ /J(2J - 1)$

Un programme d'ajustement des constantes à partir des intervalles mesurés, par une méthode de moindres carrés, a donné le meilleur accord pour les valeurs des constantes contenues dans le tableau 16. Le principe du calcul consiste à

fixer alternativement les valeurs des $A_{\alpha J}$ et des $B_{\alpha J}$, en partant pour les constantes $A_{\alpha J}$ des valeurs déduites de l'étude sur l'isotope 129.

TABLEAU 16 - (Valeurs en mK)

Niveaux	$A_{\alpha J}$ (129)	$A_{\alpha J}$ (calc.)	$B_{\alpha J}$	$B_{\alpha J}$ [29]
6p[1/2]1	13,87	13,99	1,04 (0,16)	0
6p[5/2]2	13,36	13,31	7,98	9 (2)
6p[3/2]1	13,04	12,96	0,19	1,5(0,6)
6p[3/2]2	8,89	8,83	0,97	1,2(0,6)
5d[3/2]2	0	- 0,04	- 2,84	
5d[1/2]1	23,89		- 1,1 (0,6)	
5d[5/2]2	8,18		1,34 (0,5)	

Les nombres entre parenthèses donnent les incertitudes (écarts quadratiques moyens). La comparaison des valeurs de $A_{\alpha J}$ obtenues par ce calcul, avec les valeurs obtenues à partir de l'étude sur l'isotope 129, est satisfaisante : les faibles écarts sont compris dans les incertitudes expérimentales. La dernière colonne du tableau 16 donne les valeurs de $B_{\alpha J}$ obtenues par A. Bohr et coll. [29].

II - B - 3 - Néon 21

a) - Mélange isotopique

Nous avons pu disposer dans le cas du néon-21, d'un mélange enrichi (disponible au Mound Lab.) dont la composition est donnée dans le tableau 17, où elle est comparée à celle du mélange naturel.

TABLEAU 17 - (abondances en %)

Nombre de masse	Mélange naturel	Mélange enrichi
20	90,92	21,1
21	0,26	56,3
22	8,82	22,6

b) - Intervalles mesurés

Le néon 21 possède un spin nucléaire $I = 3/2$ et des moments nucléaires magnétique et quadrupolaire respectivement égaux à $\mu_N = -0,66176$ et $Q = 0,093$ barns [35]. Les intervalles hyperfins sont du même ordre de grandeur que ceux rencontrés dans le xénon, mais les largeurs Doppler sont environ 2,5 fois plus grandes. De plus, les isotopes pairs subsistent dans le mélange enrichi, en quantité importante. Enfin les contributions magnétique et électrique à la structure hyperfine ne peuvent pas être étudiées séparément. Dans ces conditions, 2 transitions laser seulement ont pu donner des mesures exploitables, leur structure étant très simple du du fait de la valeur $J = 0$ de l'un de leurs niveaux. Ces mesures sont données dans le tableau 18.

TABLEAU 18

$\lambda_{(\mu)}$	Classification	Intervalle	Mesures (mK)	Epaisseur F.P (mm)
4,21	$5s'[1/2]_1 \rightarrow 4p'[1/2]_0$	5/2 3/2 - 3/2 3/2	60,0 (0,5)	46
5,40	$4p'[1/2]_0 \rightarrow 3d'[3/2]_1$	3/2 5/2 - 3/2 3/2	26,50(0,2)	100
			26,54(0,2)	108

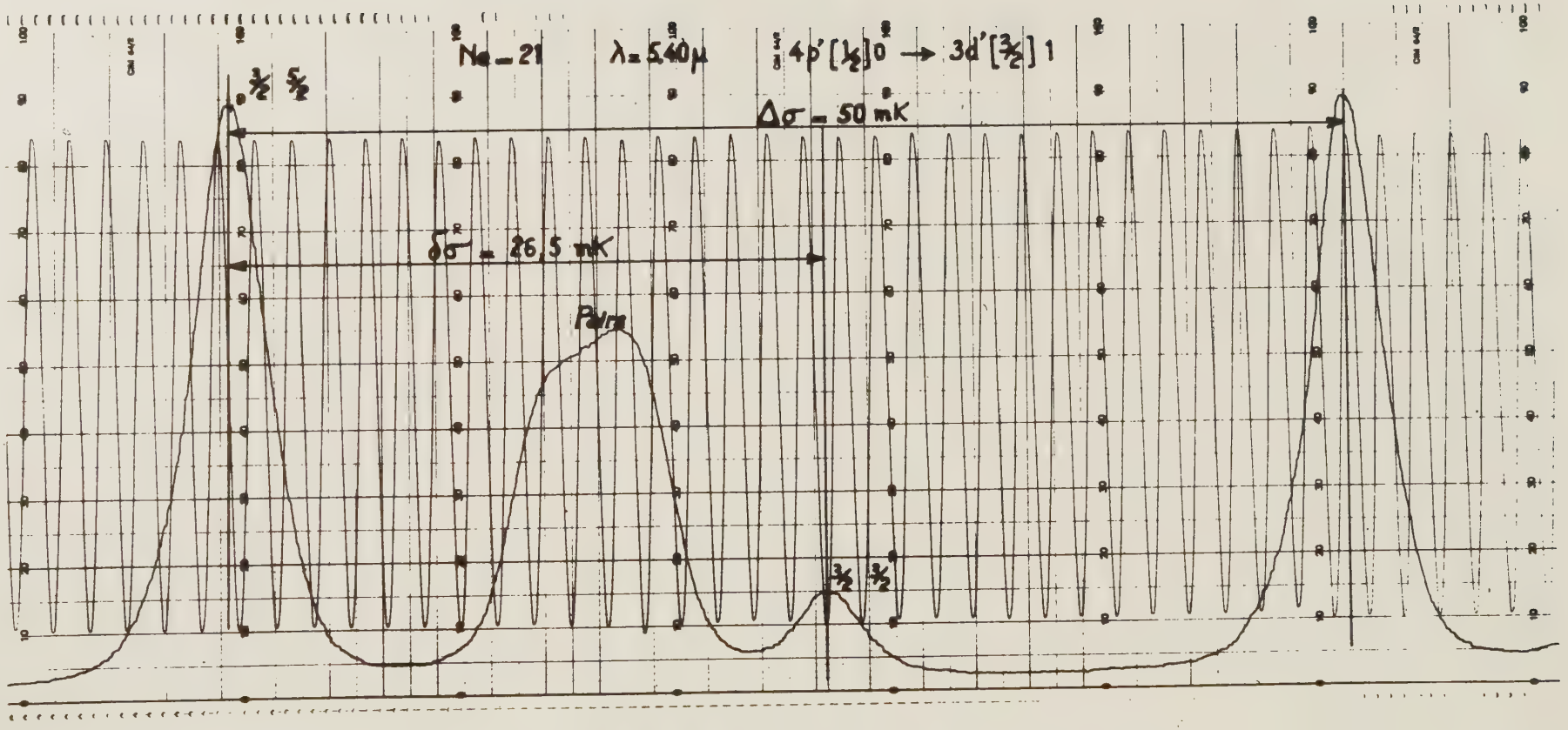


Figure 7

Un exemple d'enregistrement est montré figure 7 . Plusieurs autres transitions ayant pour un de leurs niveaux $J = 0$, n'ont donné de structures enregistrées qu'à une ou deux composantes, ce qui rend leur interprétation impossible.

c) - Constantes de structure hyperfine magnétique des niveaux

Il est possible de tirer des mesures précédentes, les constantes $A_{\alpha J}$ des niveaux (de $J \neq 0$) , en anticipant quelque peu sur l'interprétation théorique. Le calcul des énergies des niveaux de Ne I (voir Annexe II - 1) montre que les configurations $2p^5 3d$ et $2p^5 5s$ obeissent à un couplage $j - \ell$ presque pur. Or dans un tel couplage, il est assez facile de voir que pour les niveaux construits sur le terme $^2P_{1/2}$ de l'ion, la contribution due à l'effet quadrupolaire est nulle. Des mesures très précises éffectuées sur le niveau $3s[3/2]2$ par Grosof et coll. [36] permettent d'évaluer l'effet quadrupolaire sur les 2 niveaux qui nous intéressent (cf. III- A - 4 -) en tenant compte du couplage réel. Cette contribution est en effet très faible, mais nous l'avons néanmoins incluse pour déduire des mesures précédentes les constantes $A_{\alpha J}$ de la structure magnétique des 2 niveaux en question. Nous avons obtenu :

Niveaux	A_J (mK)
$5s'[1/2]1$	+ 23,8(0,6)
$3d'[3/2]1$	+ 10,5(0,3)

Le nombre assez élevé des transitions laser infrarouges observées pour le néon (cf. I-B-4), permettait d'espérer un plus grand nombre de résultats sur la structure hyperfine de l'isotope 21. La légèreté de cet élément, ainsi que la faible abondance de l'isotope impair sont à l'origine des difficultés que nous avons rencontrées. Un refroidissement du tube du laser à la température de l'azote liquide, ainsi, bien sûr, qu'un mélange plus enrichi en Ne - 21 , permettraient d'accéder facilement à de nouvelles mesures.

II - C - INTERFEROMETRE DE FABRY-PEROT SELECTEUR

Comme nous l'avons remarqué antérieurement (cf. II-B), les éffets de compétiton entre composantes à sous-niveau hyperfin commun contribuent à empêcher l'oscillation laser sur les composantes faibles. Pour tenter de pallier cette difficulté on peut penser à utiliser en guise de miroir pour la cavité laser, un dispositif extrêmement sélectif, dont la "bande passante" puisse être déplacée continuement en fonction du nombre d'onde σ . Plusieurs dispositifs ont été proposés pour être utilisés généralement comme sélecteurs de modes, leur principe étant celui d'un interféromètre à ondes multiples. Parmi ceux-ci, on peut distinguer le système décrit par P.W. Smith [37] schématiquement représenté par la figure 8 .

Fig. 8

Nous lui avons préféré un montage imaginé par R. Damaschini [38], dont les propriétés sont assez voisines et qui présente en outre plusieurs avantages pratiques.

II - C - 1 - Description de l'interféromètre

Il s'agit d'un interféromètre de Fabry-Perot comportant une lame séparatrice intérieure et éclairé latéralement (fig. 9-10) .

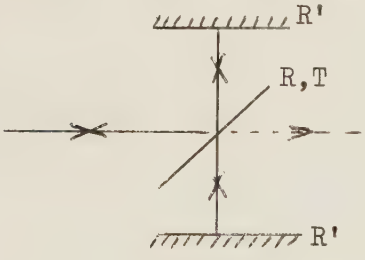
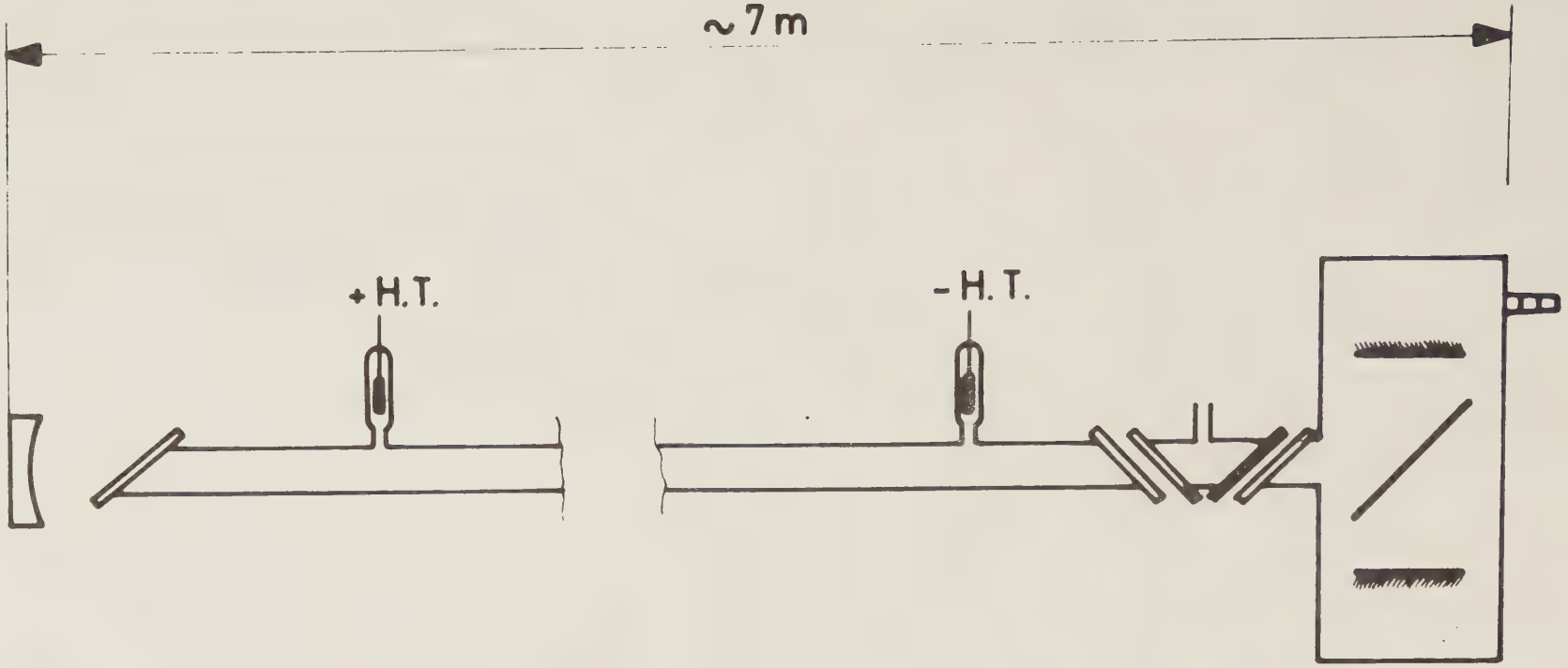


Fig. 9

Un calcul simple donne pour l'intensité de la lumière renvoyée dans la direction d'incidence, un pouvoir réflecteur du système $\mathcal{R}(\sigma)$ tel que :

$$\mathcal{R}(\sigma) = \frac{R^2R'}{(1-TR')^2}\left[1 + \frac{4TR'}{(1-TR')^2}\sin^2\Pi\frac{\sigma - \sigma_o}{\Delta\sigma}\right]^{-1}$$

A valeur constante du pouvoir réflecteur des miroirs $R' = 99{,}5\%$, la finesse N et le pouvoir réflecteur maximal $\mathcal{R}_M$ de l'interféromètre, varient en fonction de T pouvoir de transition de la séparatrice. Les courbes représentatrices (fig. 11) montrent que si l'on veut avoir un pouvoir réflecteur maximal élevé ($\mathcal{R}_M > 97\%$) , de façon à ne pas introduire de pertes prohibitives dans la cavité,



MONTAGE AVEC FABRY_PEROT SELECTEUR

Figure 9bis

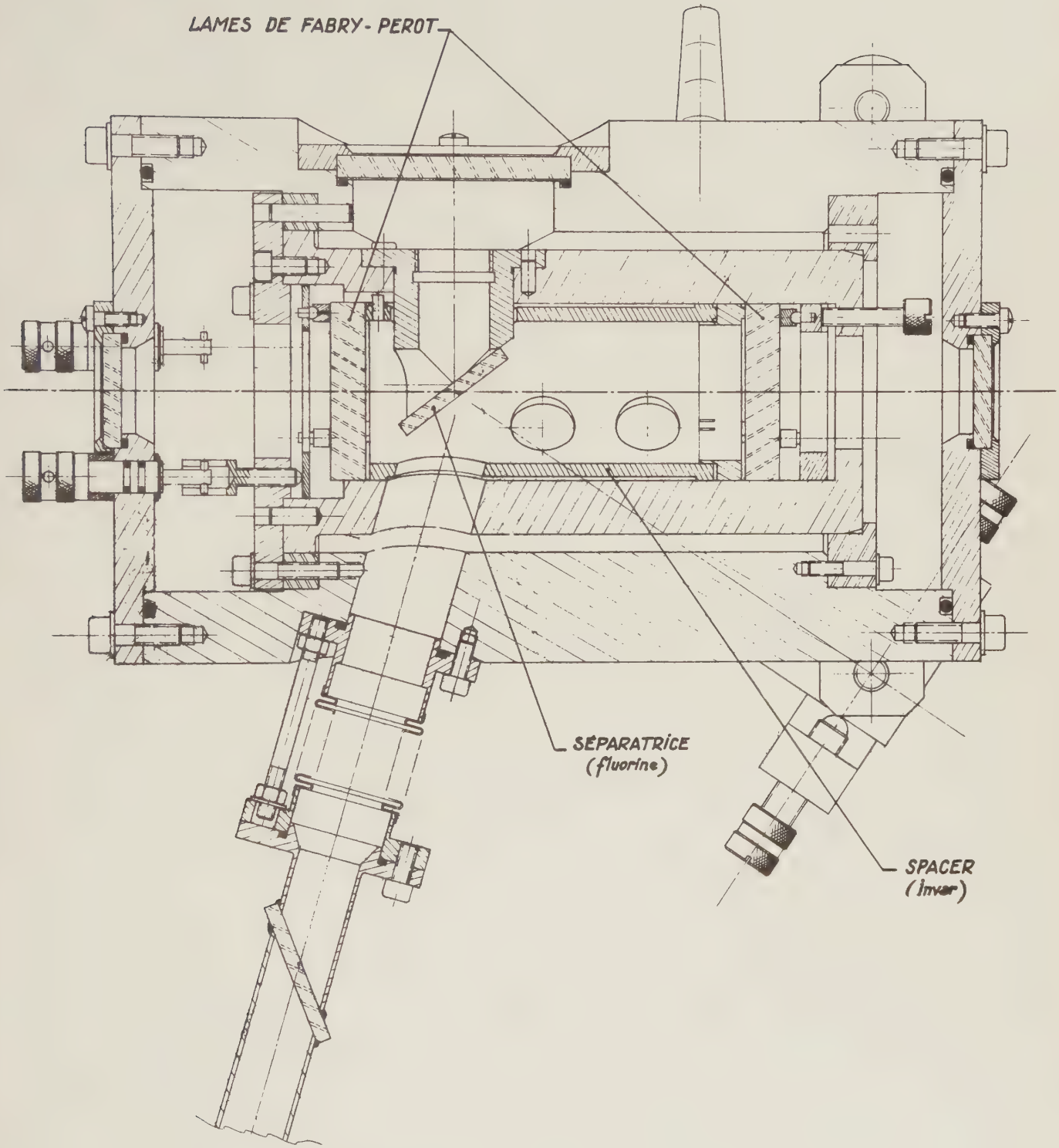
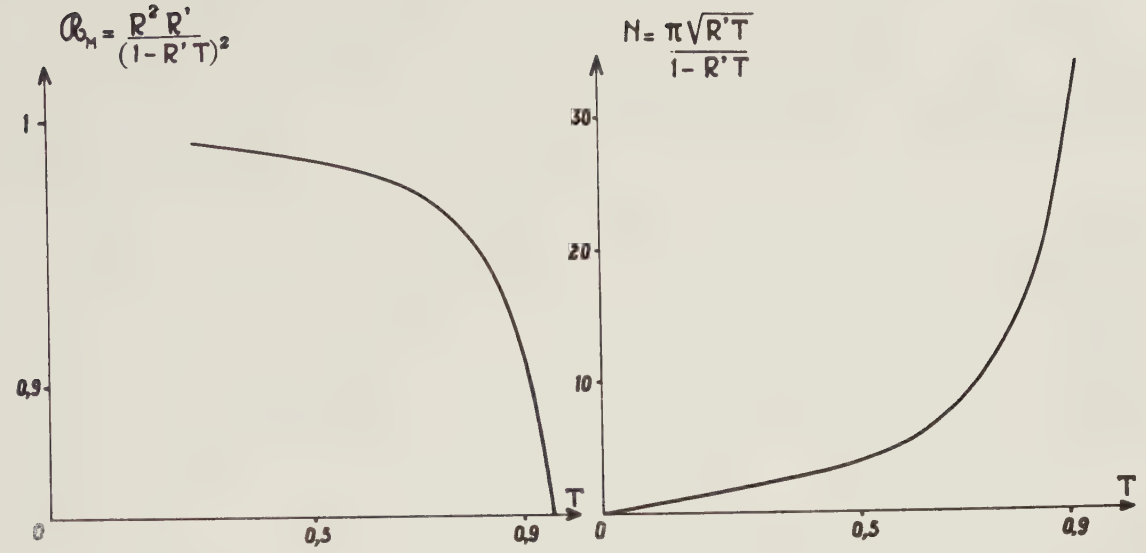


Figure 10


$\mathcal{R}_M = \frac{R^2 R'}{(1-R'T)^2}$
1
0,9
0
0,5
0,9
T
$N = \frac{\pi\sqrt{R'T}}{1-R'T}$
30
20
10
0
0,5
0,9
T

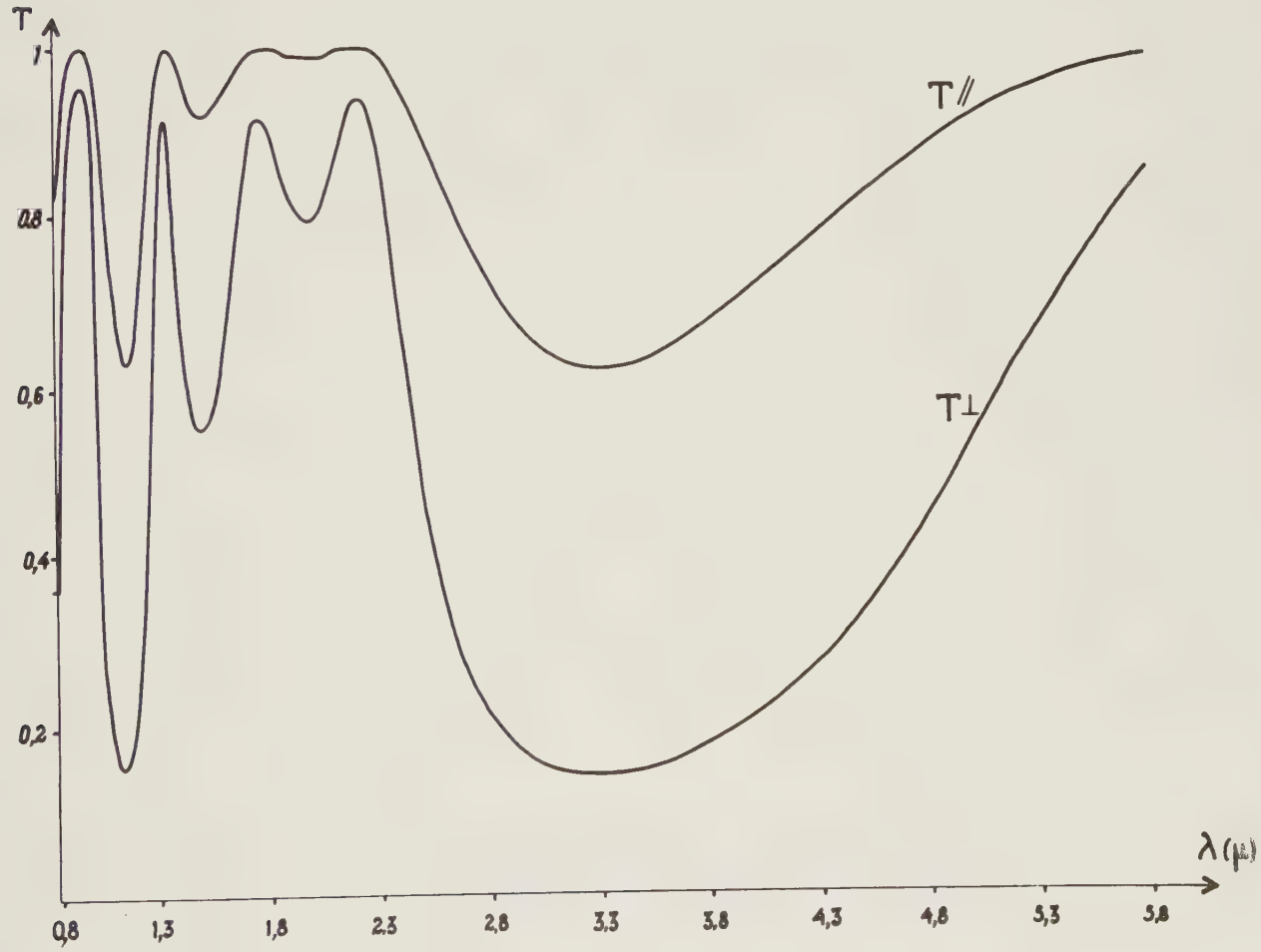

T
1
0,8
0,6
0,4
0,2
T//
T⊥
λ (μ)
0,8
1,3
1,8
2,3
2,8
3,3
3,8
4,3
4,8
5,3
5,8

Fig. 11 & 12

il faut avoir $T < 0,7$ correspondant à une finesse $N < 8,6$; tout accroissement de $\mathcal{R}_M$ s'obtient au détriment de N , le choix d'une valeur pour T ne peut être qu'un compromis entre 2 exigences contradictoires. La valeur $R' = 99,5\%$ représente une valeur assez facilement accessible (avec des revêtements multidiélectriques à 13 couches); des valeurs supérieures sont théoriquement possibles mais difficilement contrôlables.

La lame séparatrice, en fluorine, peut être revêtue sur l'une de ses faces d'un empilement de couches diélectriques, calculé pour donner un pouvoir de transmission T aussi proche que possible de la valeur $0,7$ (dans les conditions de son utilisation : angle d'incidence, domaine spectral, direction de polarisation de la lumière). La figure 12 montre la courbe de variation calculée pour T [39], en fonction de la longueur d'onde, obtenue avec un empilement de 4 couches $\lambda/4$ alternées bas indice - haut indice (Cryolithe - Zn S), pour une longueur d'onde moyenne $\lambda = 3,7\mu$, une incidence de 53° (incidence de Brewster pour la fluorine), et pour la polarisation parallèle au plan d'indice (celle du faisceau laser). On élimine ainsi les effets parasites dus à la deuxième face de la séparatrice. Cependant , le même revêtement donne pour la direction de polarisation perpendiculaire au plan d'incidence, un pouvoir de transmission $T_\perp$, dont la variation en fonction de λ est représentée aussi sur la figure 12 . Les faibles valeurs de $T_\perp$ donnent lieu à des valeurs élevées de $\mathcal{R}_M$ pour cette direction de polarisation, malgré les pertes introduites par la seconde face de la séparatrice. Dans ces conditions, l'oscillation laser peut se produire sur cette direction de polarisation, pour des raies à gain élevé. L'exploitation de ce montage nécessite alors l'utilisation d'un polariseur placé devant le récepteur. Une simple lame de calcite convenablement taillée peut faire office de polariseur infrarouge [40] dans les domaines : $3,35\mu < \lambda < 3,6\mu$ et $3,8\mu < \lambda < 4,15\mu$. Toutefois ces limitations rendent le montage peu commode et de plus, ne suppriment pas convenablement la compétition entre composantes.

Une rotation du système de 90° autour de la direction d'incidence, amène la séparatrice à travailler sur la direction de polarisation perpendiculaire au plan d'incidence sur la séparatrice. Mais il est nécessaire alors de traiter une de ses

faces avec un antireflet, l'autre face restant nue. Il se révèle malheureusement difficile de trouver des substances dont les indices permettent de faire un antireflet dans ces conditions d'utilisation [39]. Nous avons pu néanmoins effectuer des enregistrements à titre d'éssai, en utilisant une lame séparatrice en fluorine, non traitée; ces essais nous ont montré que le montage fonctionne, malgré le pouvoir réflecteur faible de la séparatrice dans ces conditions (R = 0,11) , mais les effets dus à la présence des 2 faces rendent ces enregistrements difficilement exploitables. D'autres tentatives sont actuellement en cours d'étude : elles consistent à remplacer la séparatrice en fluorine par une membrane de collodion d'épaisseur négligeable.

L'enceinte contenant l'interféromètre est close, de façon à pouvoir y faire varier la pression continuement; cette variation réalise simplement le déplacement de la "bande passante" de l'appareil. Dans la direction du faisceau lumineux, l'enceinte est fermée par une fenêtre transparente (inclinée à l'angle de Brewster); cette fenêtre, associée au reste de l'interféromètre, constitue un prisme d'indice variable dont l'effet consiste à déplacer la direction du faisceau réfléchi à mesure que la pression varie dans l'enceinte. Ce déplacement n'est pas négligeable : pour une variation de pression de 1 atmosphère, il correspond à un déplacement du point d'impact du faisceau sur l'autre miroir de la cavité, d'amplitude supérieure à 2mm; d'où un déréglage systématique important de la cavité. Nous avons compensé ce déréglage, en insérant dans la cavité un prisme d'angle double (2 faces à l'angle de Brewster) à l'intérieur duquel la pression à chaque instant est moitié de la pression dans l'enceinte de l'interféromètre.

II - C - 2 - Enregistrements

Les enregistrements ont été éffectués avec des raies laser du xénon - 131, en utilisant 2 épaisseurs optiques différentes de l'interféromètre correspondant aux intervalles entre ordres : 85,71 et 99,46 mK . Un exemple typique d'enregistrement (obtenu avec un polariseur placé devant le récepteur) est donné figure . On peut y remarquer l'allure différente des composantes à grand gain et à faible gain, et notamment dans ce dernier cas la brusque discontinuité caractéristique d'un seuil d'oscillation élevé.

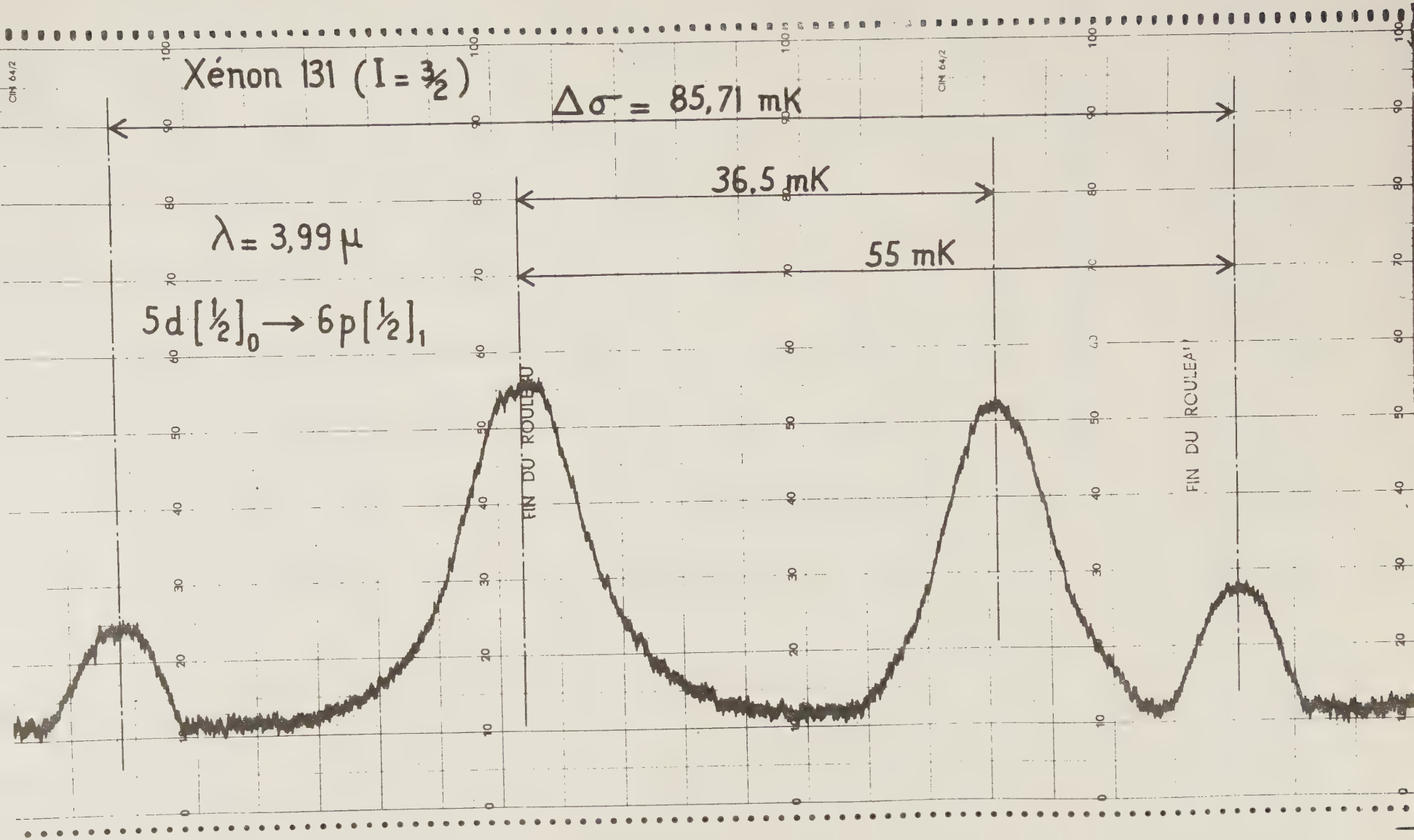


Figure 12bis

Nous ne donnons pas explicitement le résultat des mesures obtenues avec cette méthode, mais leur comparaison avec celles obtenues au moyen de l'interféromètre de Fabry-Perot extérieur à la cavité est tout à fait satisfaisante et la précision équivalente.

II - D - MESURES DE DEPLACEMENTS ISOTOPIQUES

Plusieurs auteurs se sont intéressés à la mesure des écarts isotopiques effectuée sur des transitions laser. R. Vetter [28] notamment, utilisant un laser oscillant en mode unique, a mesuré avec une grande précision, les écarts sur 6 raies entre les isotopes 36 et 40 de l'argon [41], et sur une vingtaine de raies du xénon pour une série d'isotopes pairs [42] . Ces expériences sont particulièrement bien adaptées à la mesure des faibles écarts, ce qui est le cas pour les isotopes pairs du xénon. Dans le cas de l'argon, les mesures avaient montré des écarts relativement importants, pour lesquels nous avons cherché une confirmation - notre méthode de mesure étant toute différente. Pour le xénon, nos enregistrements de structure hyperfine montrent parfois des composantes attribuables sans ambiguité à un isotope déterminé, de sorte qu'on peut en extraire une mesure d'écart isotopique. Enfin, l'extension des mesures à d'autres transitions et d'autres isotopes, nous a conduit à élaborer un nouveau montage qui nous a permis de faire quelques mesures sur le néon (isotopes 20 et 22).

Ces résultats de mesure sur l'argon, le xénon et le néon font l'objet de présent paragraphe, ainsi qu'une étude plus complète de l'effet isotopique sur les 2 raies laser infrarouges de l'hélium que nous avons observées (cf. I-B-3).

II - D - 1 - Mesures dans l'argon entre les isotopes 36 et 40

La méthode consiste à mélanger dans le tube laser, les 2 isotopes à étudier, à des pressions égales. A moins qu'une séparation incomplète ne donne directement le mélange, cette méthode présente donc un grave inconvénient lorsque l'un de ces isotopes est rare. De plus, pour une pression totale donnée, l'amplification est très diminuée pour chacun des isotopes, et l'oscillation laser ne se produit pas

pour les raies faibles. On peut chercher à la rétablir en jouant sur la pression totale et sur le courant, mais dans bien des cas on n'y parvient pas. Enfin l'écart doit être suffisamment grand pour que les 2 composantes soient séparées dans la source (voir un exemple figure 13). Nos mesures portent sur 3 transitions, les résultats sont donnés dans le tableau 19 et comparés à ceux obtenus par R. Vetter sur ces mêmes raies.

TABLEAU 19

$\lambda_{(\mu)}$	Classification	Mesures F.P (mK)	Mesures Vetter [41]
2,3973	$3d[1/2]0 \rightarrow 4p'[1/2]1$	35,2 ± 0,1	35,13 ± 0,04
3,1333	$5p[1/2]1 \rightarrow 5s\ [3/2]2$	5	4,49 ± 0,04
5,8038	$4d[3/2]2 \rightarrow 5p\ [3/2]2$	14,0 ± 0,4	14,10 ± 0,03

Pour 2 transitions les résultats sont très voisins, pour la troisième, nous avons observé une structure non résolue ne permettant pas de mesure précise, l'écart dans ce dernier cas étant inférieur à la largeur Doppler : $\Delta\sigma_D \simeq 7$ mK . Nous avons cherché à étendre les mesures à d'autres transitions, particulièrement à celles du type nd → n'p , puisqu'on attend pour elles de grands déplacements [28], mais nos conditions de fonctionnement n'ont pas permis l'oscillation simultanée de ces transitions pour les 2 isotopes.

II - D - 2 - Mesures dans le xénon entre les isotopes 129 et 131.

Au cours de l'étude de la structure hyperfine du xénon 129 avec un mélange enrichi, les enregistrements nons ont montré des composantes étrangères à la structure de cet isotope, appartenant soit au groupe des isotopes pairs, soit à la structure de l'autre isotope impair. Il est donc possible de déterminer pour ces transitions, le centre de gravité de la structure des isotopes impairs et de les situer l'un par rapport à l'autre (il s'agit évidemment du centre de gravité théo-

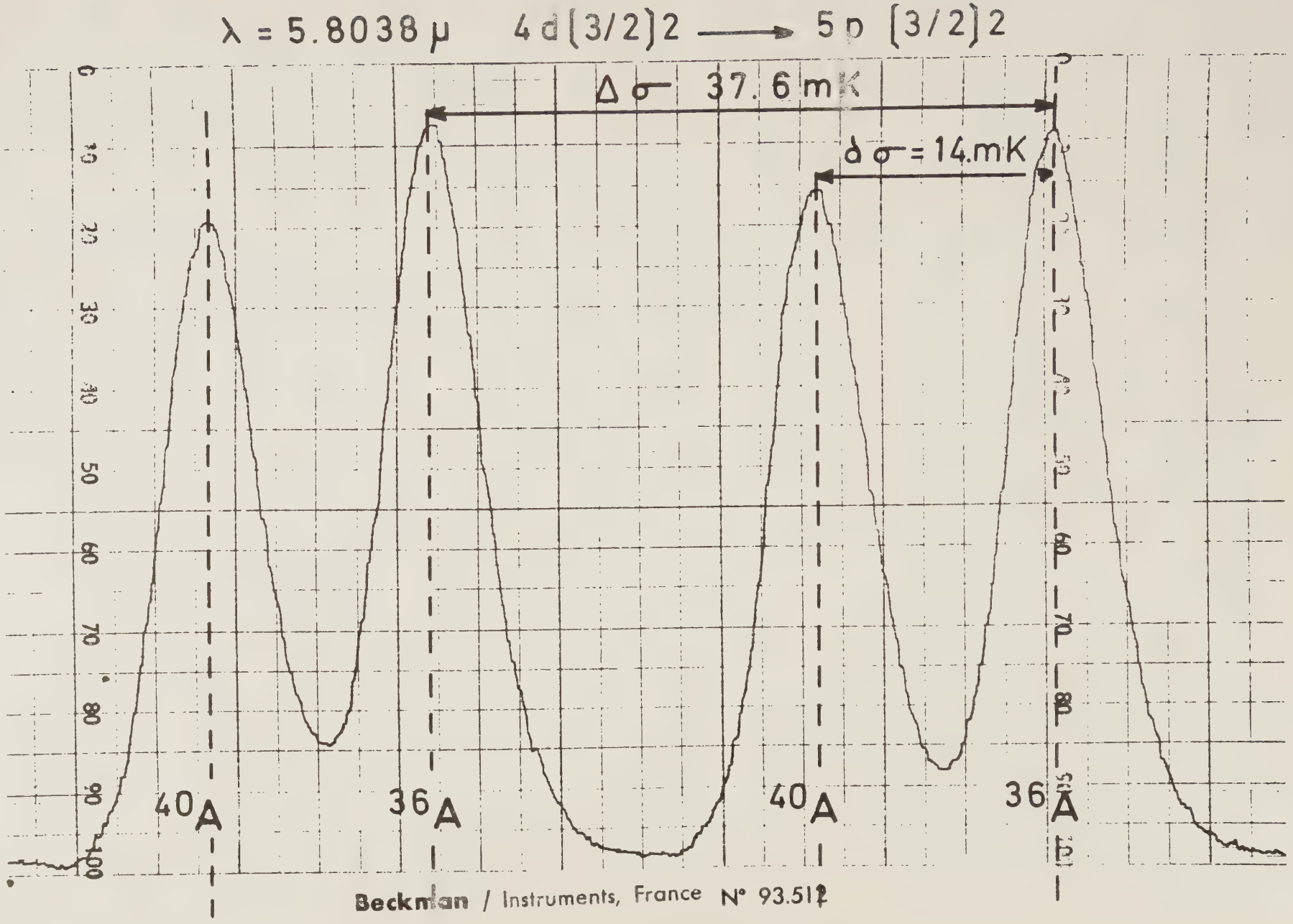

λ = 5.8038 μ 4d[3/2]2 ⟶ 5p [3/2]2
Δσ = 37.6 mK
δσ = 14.mK
40 A
36 A
40 A
36 A
Beckman / Instruments, France N° 93.512

Figure 13

rique, défini à partir des centres de gravité relatifs aux niveaux). Au total, des écarts sont donnés pour 4 raies (tableau 20), et comparés à ceux mesurés par R. Vetter [42] pour le couple d'isotopes (132-130).

TABLEAU 20 - (Valeurs en mK)

$\lambda_{(\mu)}$	Classification	$\delta\sigma$(131-129)	$\delta\sigma$(132-130)
3,27	5d[3/2]2 → 6p[1/2]1	1,9	1,76 ± 0,01
3,67	5d[1/2]1 → 6p[1/2]1	1,5	1,57 ± 0,02
3,99	5d[1/2]0 → 6p[1/2]1	1,2	1,51 ± 0,04
7,31	5d[3/2]2 → 6p[3/2]1	1,4	1,57 ± 0,01

Les valeurs obtenues pour le couple (131-129) sont assez voisines de celles obtenues pour le couple (132-130), d'autant que la précision de nos déterminations demeure assez médiocre. On peut estimer l'incertitude d'après les écarts quadratiques moyens : elle est comprise entre 0,3 et 0,5 mK .

II - D - 3 - Mesures sur le néon entre les isotopes 20 et 22

Pour pouvoir étendre les mesures de déplacements isotopiques, nous avons entrepris le montage d'une nouvelle expérience dans laquelle les structures sont toujours analysées avec un spectromètre extérieur à la cavité laser, mais à l'intérieur de la cavité sont disposés 2 tubes complètement indépendants et remplis avec des isotopes différents. Longs de 3 m chacun, ces tubes sont mis bout à bout et soigneusement alignés. Ils sont excités alternativement durant des intervalles de temps qui peuvent être choisis tels qu'on obtienne soit des enregistrements points par points, soit des enregistrements continus de la composante due à l'un des isotopes puis celle due à l'autre isotope (voir figure 14).

L'exploitation de ce montage effectuée avec J.F. Lesprit, en est à son début. Elle a permis la mesure des déplacements entre les isotopes 20 et 22 du néon, sur

6 raies laser. Les résultats sont donnés dans le tableau 21.

L'expérience s'est révelée plus délicate qu'on aurait pu le penser à priori : les premiers essais nous l'ont montré. Ils ont été suivis de nombreux tests de reproductibilité faits notamment en introduisant le même isotope à la même pression dans les 2 tubes. Or ces tubes n'ont pas leurs axes exactement confondus et la cavité n'est pas parfaitement symétrique. Dans ces conditions, la répartition d'énergie entre les différents modes et l'axe moyen (de ces modes) différent quelque peu suivant que l'un ou l'autre des 2 tubes est allumé. Il en résulte des déplacements instrumentaux du même genre que ceux que l'on observe avec des sources classiques lorsque les faisceaux utiles n'ont pas exactement la même structure [43]. Nous avons cependant pu rendre ces défauts négligeables en introduisant des diaphragmes à l'intérieur de la cavité, notamment au voisinage des miroirs et au centre dans l'espace laissé libre entre les 2 tubes. L'erreur correspondante n'excède pas 0,05 mK dans ces conditions. Cette erreur systématique peut d'ailleurs être partiellement éliminée par inversion des isotopes dans les 2 tubes.

TABLEAU 21 - (Valeurs en mK)

$\lambda_{(\mu)}$	Classification	$\delta\sigma$(Ne 22 - Ne 20)	$\delta\sigma_B$	$\delta\sigma_{spec.}$
5,17	5d'[5/2]2 → 5p'[3/2]1	7,06 ± 0,1	4,79	2,27
5,40	4p' 1/2 0 → 3d 3/2 1	5,88 ± 0,1	4,58	1,30
5,66	4p 1/2 0 → 3d 3/2 1	7,62 ± 0,1	4,37	3,25
7,65	4p 5/2 0 → 3d 7/2 3	5,10 ± 0,1	3,24	1,86
7,70	4p 3/2 2 → 3d 5/2 3	4,81 ± 0,1	3,21	1,60
8,06	4p 5/2 3 → 3d 7/2 4	4,81 ± 0,1	3,07	1,74

Nous donnons une limite supérieure pour l'erreur de mesure (0,1 mK) , qui tient compte de l'incertitude sur la valeur moyenne de l'écart instrumental (0,05 ± 0,03 mK) , de la dispersion des mesures (au maximum de 0,04 mK) , enfin de l'erreur résultant - malgré les précautions prises - de légères différences de pression entre les 2 tubes (au maximum de 0,01 mK) .

Les 2 dernières colonnes du tableau donnent les valeurs calculées du déplacement de masse normal de Bohr ($\delta\sigma_B$) et les valeurs que l'on peut déduire pour le déplacement spécifique de masse ($\delta\sigma_{spec.}$) si l'on admet un déplacement de volume négligeable (hypothèse justifiée par le faible nombre de masse de ces isotopes) [46].

II - D - 4 - Cas de l'hélium [44]

Une étude de l'effet isotopique des 2 transitions laser de l'hélium est intéressante à plusieurs égards. Ces raies ne font intervenir que des niveaux de singulet , dépourvus de structure fine ou hyperfine, et permettent de faire des mesures d'une assez bonne précision. De plus, ces niveaux sont assez élevés, difficiles à étudier au moyen de raies visibles très élargies par effet Doppler. Expérimentalement, les mesures pouvaient être effectuées par 2 méthodes différentes, au moins pour la raie de plus petite longueur d'onde $\lambda = 4{,}60\mu$: soit avec un interféromètre de Fabry-Perot, soit par comptage de franges avec un interféromètre de Michelson. Enfin, des calculs théoriques extrèmement précis dus à Pékeris et coll. [45], permettaient une bonne confrontation entre valeurs mesurées et valeurs calculées.

a) - Mesures avec l'interféromètre de Michelson

Elles ont été effectuées avec un interféromètre mis au point par J.F Lesprit [6] et portent sur la raie $\lambda = 4{,}60\mu$. Le principe de la mesure consiste à déterminer la longueur d'onde de la transition correspondant à chacun des 2 isotopes, en la comparant à celle d'un étalon secondaire : la raie verte de ^{202}Hg . Un dispositif électronique compte simultanément les franges dues à la raie laser et celles dues à la raie étalon. La première et la dernière frange comptées du signal

laser, déclenchent automatiquement d'une part le début et l'arrêt du comptage, d'autre part un balayage unique des traces d'un oscilloscope; ces traces sont photographiées et permettent la mesure de l'excédent fractionnaire.

Le résultat des mesures, effectuées dans l'air normal, (t = 15°C et p = 760torrs) donne :

$$\lambda(^4He) = 4,60535_6\mu$$

$$\lambda(^3He) = 4,60567_8\mu$$

On en déduit par différence la valeur de l'écart isotopique pour la transition :

$$\delta\sigma(^4He - ^3He) = 151,5 \text{ mK} \pm 1,5 \text{ mK}$$

b) - Mesures avec l'interféromètre de Fabry-Perot

Nous avons mesuré les écarts isotopiques au moyen de l'interféromètre F.P plan extérieur à la cavité laser, suivant un montage identique à celui utilisé pour les mesures de structure hyperfine, dans des conditions sensiblement différentes pour les 2 raies laser de l'hélium.

Pour la raie $\lambda = 4,60\mu$, un mélange convenablement ajusté des 2 isotopes, permet d'observer l'oscillation simultanée des 2 transitions correspondant à chacun d'eux. La mesure, effectuée avec 3 épaisseurs différentes de l'étalon (20 mm, 46 mm et 108 mm) , donne pour valeur moyenne de l'écart isotopique dans ces conditions (voir figure 15) :

$$\delta\sigma(^4He - ^3He) = 153,5 \pm 1 \text{ mK}$$

La petite différence entre le résultat de la mesure par cette méthode et celui obtenu avec l'interféromètre de Michelson, n'est pas très significative compte tenu des domaines d'incertitude. Cependant une erreur systématique peut s'introduire du fait des déplacements par effets de pression, cette erreur étant différente suivant qu'on opère avec des isotopes purs ou avec des mélanges. L'intervelle de pression à l'intérieur duquel on observe l'oscillation laser (0,2 - 0,4torrs) est trop petit pour permettre une étude précise de ces effets. Une tentative effec-

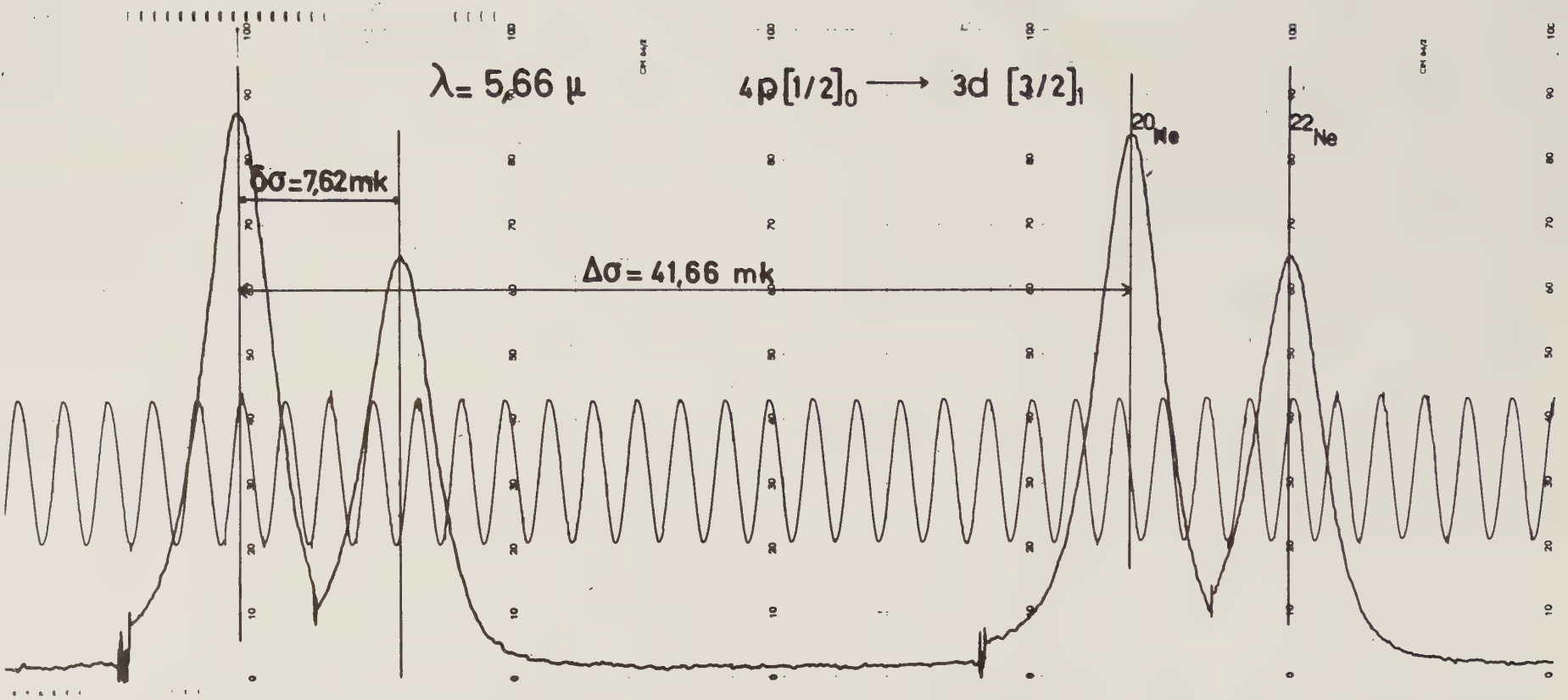


Figure 14

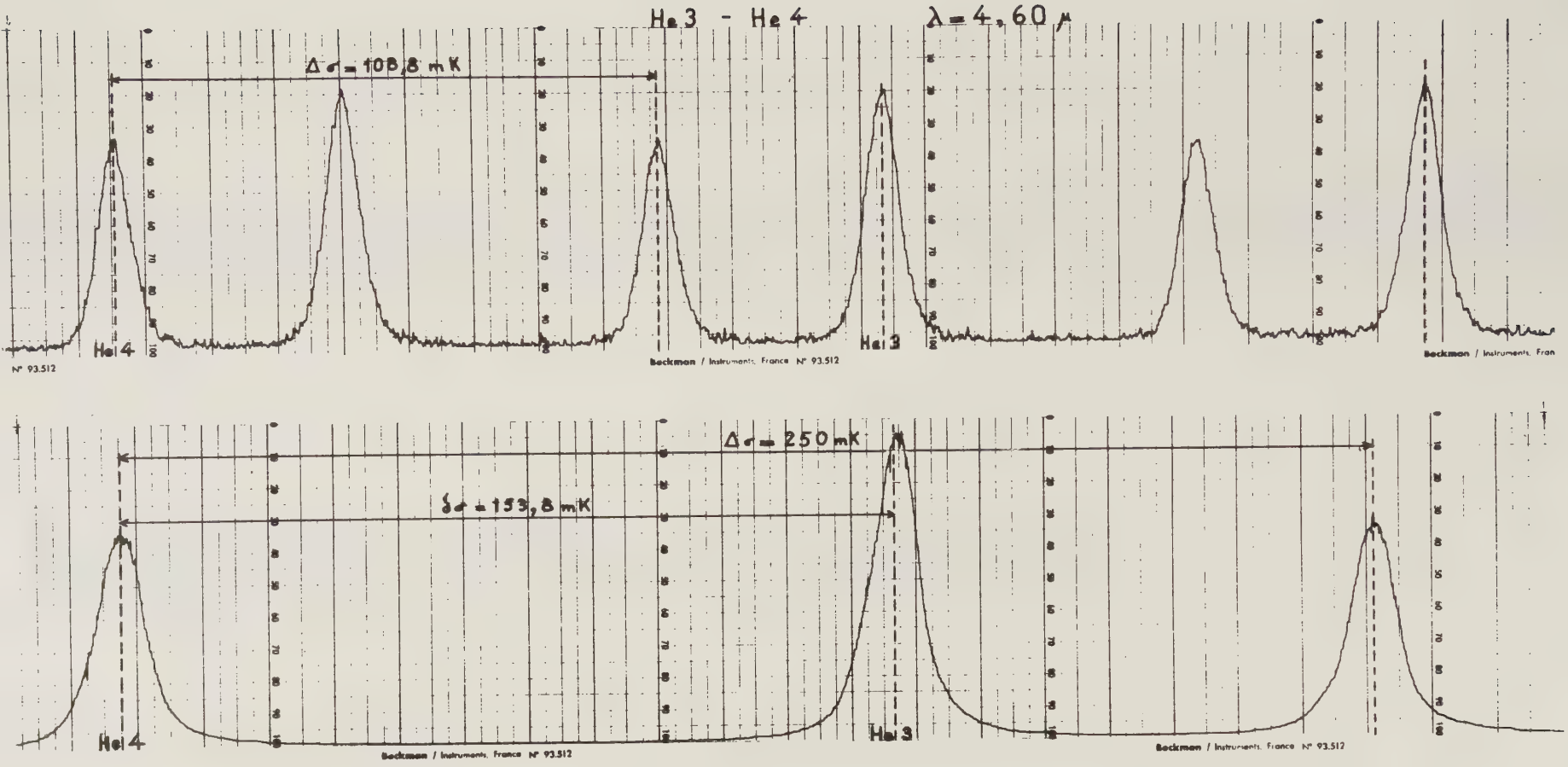


Figure 15

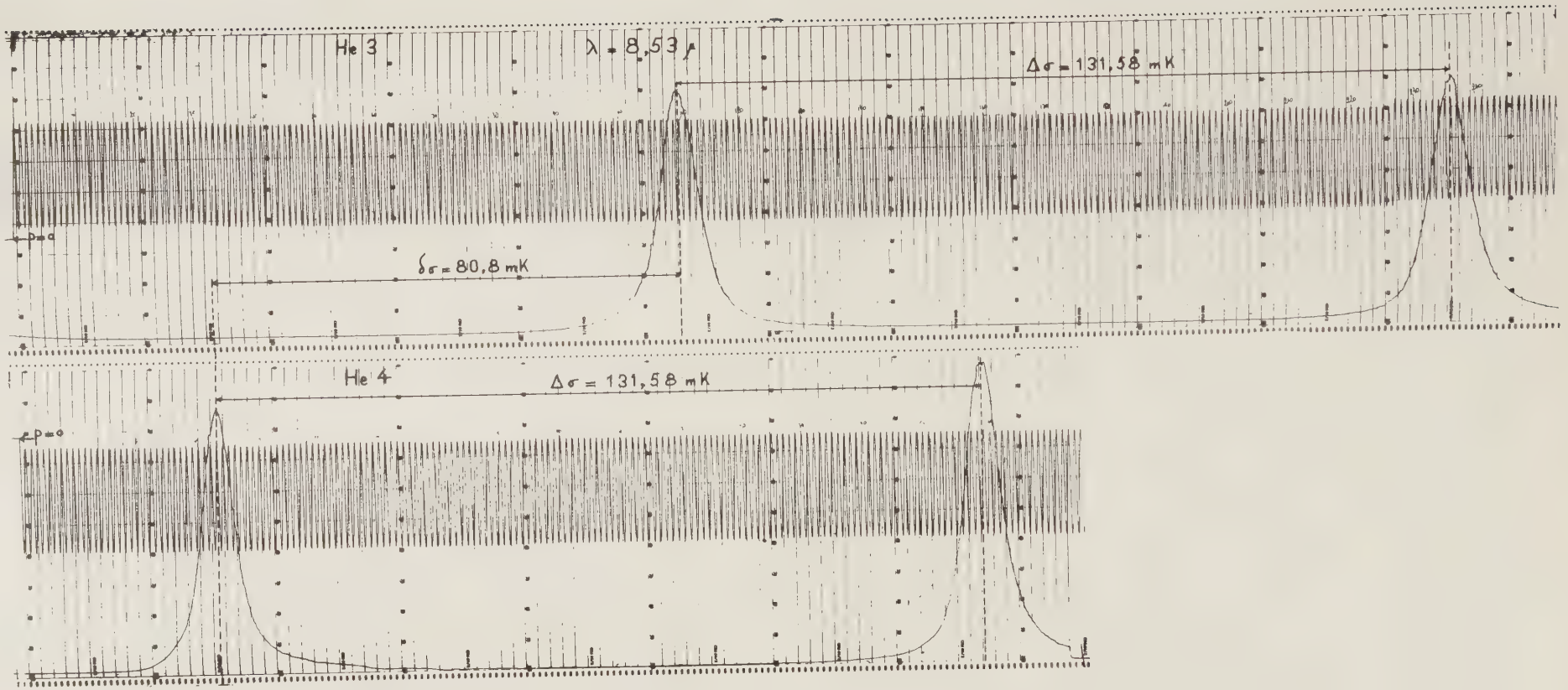


Figure 16

tuée avec ^4He à la pression de 0,25torr puis à 0,35torr, a montré un petit déplacement de l'ordre de 1,5 ± 1 mK , de sorte que l'effet différentiel qui intervient dans la mesure de l'écart isotopique est certainement inférieur à 1 mK .

Pour la raie $\lambda = 8,53\mu$ nous n'avons pas pu obtenir l'oscillation laser sur les 2 isotopes simultanément. Cette transition se prêtait donc bien à une mesure avec l'interféromètre de Michelson, mais ce dernier n'était pas utilisable à cette longueur d'onde. Nous avons effectué des enregistrements séparés avec l'interféromètre de F.P. Chaque enregistrement est étalonné en différence de marche, à l'aide des franges du réfractomètre. Le point à pression nulle constitue l'origine commune à tous les enregistrements. En effet, pour un ordre déterminé, il correspond à un nombre d'onde défini avec une incertitude de l'ordre de 0,2 mK (incertitude due aux éventuelles variations thermiques d'épaisseur). La mesure, effectuée avec 2 épaisseurs différentes de l'étalon (38 mm et 46 mm) , conduit pour cette transition à un écart isotopique (voir figure 16) :

$$\delta\sigma(^4He - ^3He) = 80,8 \pm 1 \text{ mK}$$

c) - Interprétation théorique

Le déplacement isotopique des niveaux d'énergie est ici la somme du déplacement de masse normal (effet de Bohr) et du déplacement spécifique de masse . L'évaluation du premier est immédiate, celle du second présente quelques difficultés. Ce problème a été résolu, par Pékeris et coll. [45], qui ont fait le calcul des fonctions d'onde des orbitales correspondant aux termes S et P les plus bas de He I . Ils en ont déduit une évaluation très précise de l'effet spécifique, et ont montré en particulier que cet effet n'est pas négligeable pour les niveaux $n\,^1S$ et $n\,^3S$ (si les configurations étaient pures, l'effet spécifique serait nul pour les paires d'électrons ℓ et ℓ' telles que $|\ell - \ell'| \neq 1$ [46]). Cependant, l'effet spécifique de masse n'a pas été calculé par Pékeris pour le niveau $5\,^1P_1$ (niveau inférieur de la transition $\lambda = 8,53\mu$) , de sorte que nous avons été amené à en chercher une évaluation par extrapolation à partir des valeurs calculées pour les niveaux $n\,^1P$ (n = 2, 3 et 4). Nous avons effectué cette extrapolation en

utilisant la formule de Hugues-Eckart [47] .

$$\delta T_{spec.} = - \frac{m}{M} R_y \frac{128}{3} (Z_i Z_e)^5 \frac{(Z_i n - Z_e)^{2n-4}}{(Z_i n + Z_e)^{2n+4}} n^3 (n^2 - 1)$$

où $Z_i = 2$ et $Z_e = 1$

On peut associer, par cette formule, à chaque valeur donnée par Pékeris un nombre quantique éffectif n^* . La courbe $n^* = f(n)$ se trouve être une droite à une excellente approximation (voir courbe fig. 17), elle permet l'extrapolation dans de bonnes conditions.

TABLEAU 22

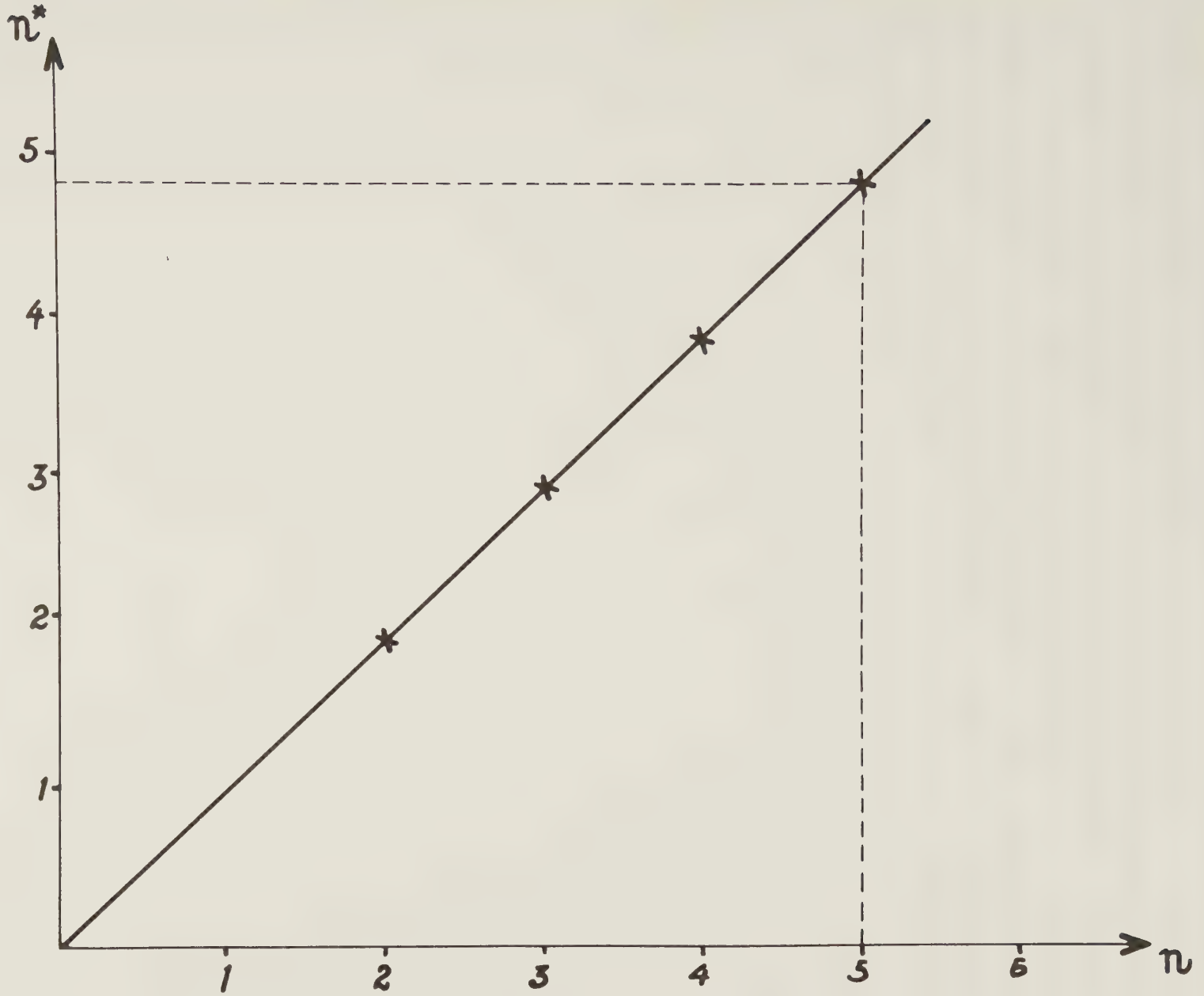
niveaux	2^1P	3^1P	4^1P	5^1P
$\Delta T^{Pek}_{spec.}$	- 453,10	- 143,16	- 61,56	- 31,79
n^*	1,9335	2,8908	3,8468	4,8036

Les valeurs numériques sont données dans le tableau 22 où les valeurs ainsi extrapolées pour le niveau 5^1P ont été encadrées.

Il est possible alors de calculer complètement le déplacement isotopique total pour chacune de ces transitions. Les résultats de ce calcul sont contenus dans le tableau 23 et comparés aux résultats de mesure.

TABLEAU 23

$\lambda(\mu)$	Niveaux	$\delta T_{spec.}$	$\delta\sigma_{Bohr}$	$\delta\sigma_{total}$	$\delta\sigma_{mesuré}$
4,60	5^1S_0	- 6,86	97,39	152,09	151,5 ± 1,5 (M)
	4^1P_1	- 61,56			153,5 ± 1 (FP)
8,53	6^1S_0	- 4,25	52,59	80,13	80,8 ± 1
	5^1P_1	- 31,79*			


n*
5
4
3
2
1
1
2
3
4
5
6
n

L'accord de nos mesures avec les valeurs calculées confirme expérimentalement la grande précision des travaux de Pékeris. Le calcul de l'effet spécifique de masse est en effet très sensible à la qualité des fonctions d'onde. Une telle confirmation trie son intérêt du sens même des calculs de Pékeris : il s'agit de la tentative la plus complète et la plus précise de résolution de l'équation de Schrödinger dans le cas d'un système à 3 particules. La même justification explique en particulier la mise en oeuvre d'expériences délicates du type de celles éffectuées par Lurio et coll. [48] pour mesurer avec précision l'écart isotopique sur la transition spontanée $\lambda = 2{,}06\mu$ $(2^1P_1 \rightarrow 2^1S_0)$ de He I .

CHAPITRE III

INTERPRETATION THEORIQUE DES STRUCTURES HYPERFINES

INTRODUCTION

Les études théoriques visant à l'interprétation des mesures de structure hyperfine présentent un double intérêt. Le premier vient de ce qu'elles permettent une évaluation des moments nucléaires. Durant une longue période, d'ailleurs, ces méthodes ont constitué la seule voie expérimentale d'accés à ces grandeurs nucléaires. Il n'en est plus ainsi aujourd'hui en ce qui concerne les moments magnétiques nucléaires qui peuvent être mesurés directement avec une grande précision, mais pour les moments électriques, la structure hyperfine demeure encore la seule possibilité d'évaluation.

Le deuxième intérêt vient de ce que l'interprétation des constantes mesurées de structure hyperfine des niveaux, utilise les fonctions d'onde déterminées le plus souvent à partir des énergies; elle peut alors constituer un excellent test de qualité pour ces fonctions d'onde. Cet aspect des études de structure hyperfine prend une importance grandissante. Le nombre élevé de niveaux excités sur lesquels on éffectue des mesures avec une bonne précision, permet d'espérer la mise en évidence de phénomènes spéciaux tels que ceux dûs aux interactions de configurations proches et lointaines, les éffets relativistes etc... L'étude que nous avons faite est plus caractéristique de ce dernier aspect.

La phase préliminaire à toute tentative d'interprétation extensive de la structure hyperfine consiste donc en une étude aussi précise que possible des configurations interessées au terme de laquelle on puisse déterminer les fonctions

d'onde des niveaux. On dispose de méthodes variées pour de telles études, qu'il s'agisse de méthodes absolues comme celle du potentiel paramétrique [49], ou bien de la méthode empirique communément appelée "méthode paramétrique" qui est une interprétation semi-phénomènologique dans laquelle les intégrales radiales responsables des interactions électrostatiques ou du couplage spin-orbite sont des paramètres ajustables. Dans l'état actuel il semble que cette dernière méthode soit celle qui donne les résultats les plus précis quant aux vecteurs propres, de sorte que nous l'avons préférée aux autres. Nous l'avons utilisée pour décrire les niveaux des configurations paires et impaires les plus basses des spectres de Ne I et Xe I, en tenant compte explicitement des interactions de configurations proches, les interactions de configurations lointaines étant partiellement prises en compte par l'introduction d'un paramètre effectif $\overline{\alpha}$ [50]. Afin de ne pas alourdir inutilement cet exposé, nous avons choisi de renvoyer la description du calcul paramètrique des configurations en Annexe II.

Connaissant les vecteurs propres des niveaux, l'interprétation de la structure hyperfine consiste en une nouvelle étude empirique qui conduit à la détermination des constantes de structure hyperfine des électrons. Des théories approchées permettent l'évaluation de ces paramètres; la confrontation de ces valeurs calculées a priori avec les valeurs tirées de l'expérience permet de juger la validité des approximation faites. De la qualité des fonctions d'onde dépend la précision des résultats, exprimée par les écarts quadratiques moyens sur les constantes de structure hyperfine des niveaux et par les écarts-type des paramètres électroniques.

L'objet de ce chapitre est limité à l'interprétation de la structure hyperfine; après les rappels théoriques nous donnons les résultats de l'étude sur le néon 21 et les isotopes 129 et 131 du xénon.

III - A - TRAITEMENT CLASSIQUE

La répartition des nucléons dans le noyau est responsable de l'apparition des spin et moments nucléaires. Ainsi le spin nucléaire I résulte de la composition des moments orbitaux et des spin des protons et neutrons du noyau, de même que le

moment dipolaire magnétique nucléaire μ_N résulte de la superposition des moments magnétiques des nucléons. Quant au moment quadrupolaire électrique Q , il exprime dans une image classique, le défaut de symétrie sphérique dans la répartition des charges électriques à l'intérieur du noyau. D'une façon générale, le calcul conduit à un développement en termes multipolaires électriques et magnétiques, mais nous ne nous interessons qu'aux moments dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique, les moments d'ordres supérieurs paraissant tout à fait négligeables.

III - A - 1 - Expressions des hamiltoniens

La théorie électromagnétique classique permet le calcul des énergies d'interaction, à partir desquelles il est possible de déduire les expressions des hamiltoniens.

Le calcul des opérateurs est exposé dans de nombreux ouvrages de base [26], nous nous contenterons d'en rappeler les résultats. Nous empruntons en outre la plupart des notations à un récent article de mise au point sur le sujet [51].

a) - Partie magnétique :

L'opérateur peut s'écrire

$$H_\mu = 2\beta\beta_N\mu_N \frac{1}{I} \sum_i \left\{ \frac{\vec{N}_i}{r_i^3} + \frac{8\pi}{3}\delta(\vec{r}_i).\vec{s}_i \right\} . \vec{I} \equiv (X^{(1)}.I^{(1)})$$

avec pour l'électron i : $\vec{N}_i = \vec{\ell}_i - \vec{s}_i + 3\vec{r}_i . \frac{\vec{r}_i.\vec{s}_i}{r_i^2}$

$$\equiv \ell_i^{(1)} - \sqrt{10}(s^{(1)}.C^{(2)})_i^{(1)}$$

On a encore :

β magnéton de Bohr

β_N magnéton nucléaire

μ_N moment magnétique nucléaire exprimé en magnétons nucléaires.

$\delta(\vec{r}_i)$: distribution de Dirac, pour laquelle on a la relation de normalisation : $\int \Psi^*(\vec{r})\ \delta(\vec{r})\ \Psi(\vec{r})\ d\vec{r} = |\ \Psi(0)\ |^2$. Le terme qui la contient est souvent appelé terme de contact de Fermi. Ce terme, proportionnel à la valeur moyenne $|\ \Psi_i(0)\ |^2$, c'est à dire à la probabilité de présence de l'électron i au noyau, est seul non nul pour des électrons ns .

Remarque :

Il est possible de trouver un opérateur éffectif plus simple, mais valable seulement pour un niveau (αJ) :

$$H_\mu(\alpha J) = A_{\alpha J}\ .\ \vec{I}\ .\ \vec{J}$$

b) - Partie électrique :

L'opérateur peut s'écrire :

$$H_Q = -\frac{e^2\,Q}{I(2I-1)} \sum_i \frac{1}{r_i^3}\,(C_i^{(2)}.K^{(2)}) \equiv (Y^{(2)}.K^{(2)})$$

où $K^{(2)}$ est un opérateur purement nucléaire :

$$K^{(2)} = \sqrt{\frac{3}{2}}\ \left\{ I^{(1)}.I^{(1)} \right\}^{(2)}$$

Q : moment quadrupolaire électrique du noyau (dont l'unité usuelle est le barn : 1 barn = 10^{-24} cm^2).

Remarque :

Pour la structure quadrupolaire, il est encore possible de trouver un opérateur éffectif agissant seulement sur les fonctions d'onde des niveaux (αJ) . Son expression n'est pas très simple, elle est donnée par :

$$H_Q(\alpha J) = \frac{B_{\alpha J}}{2I(2I-1)J(2J-1)} \left[\ 3(\vec{I}.\vec{J})^2 + \frac{3}{2}\,(\vec{I}.\vec{J}) - I(I+1)J(J+1)\right]$$

III - A - 2 - Calculs des énergies - Formule de casimir

Si l'on note la fonction d'onde électronique de l'atome isolé, sans structure hyperfine, par $| \alpha\ J\ M_J >$, on peut calculer très simplement l'énergie de perturbation au premier ordre, en utilisant les méthodes générales de l'algèbre de Racah. On obtient ainsi :

a) - Pour la partie magnétique :

$$\Delta W^{(\mu)}_{\alpha JF} = < (\alpha J, I) F M_F | H_\mu | (\alpha J, I) F M_F >$$

$$= < (\alpha J, I) F M_F | (X^{(1)} . I^{(1)} | (\alpha J, I) F M_F >$$

$$= (-1)^{J+I+F} \left\{ \begin{matrix} J & I & F \\ I & J & 1 \end{matrix} \right\} < I \,||\, I^{(1)} ||\, I > . < \alpha J \,||\, X^{(1)} ||\, \alpha\ J >$$

$$= (-1)^{J+I+F} \left\{ \begin{matrix} J & I & F \\ I & J & 1 \end{matrix} \right\} \left[I(I+1)(2I+1) \right]^{1/2} < \alpha J \,||\, X^{(1)} ||\, \alpha J >$$

Le développement du symbole 6j donne la dépendance en F , soit :

$$\Delta W^{(\mu)}_{\alpha JF} = \frac{1}{2} A_{\alpha J} \left[F(F+1) - I(I+1) - J(J+1) \right] = \frac{1}{2} A_{\alpha J} \cdot C_F$$

(cette expression peut être établie directement à partir de l'opérateur éffectif : $A_{\alpha J}\ \vec{I} \cdot \vec{J}$).

C'est la formule de Casimir pour la structure hyperfine magnétique, avec la constante de structure magnétique du niveau (αJ) :

$$A_{\alpha J} = \frac{< \alpha J \,||\, X^{(1)} \,||\, \alpha J >}{\left[J(J+1)(2J+1) \right]^{1/2}} \qquad (\text{avec } J \geqslant \frac{1}{2})$$

Cette expression pour l'énergie hyperfine magnétique rend compte de la règle de Landé pour les intervalles entre sous-niveaux hyperfins.

L'étape suivante consiste à calculer les constantes $A_{\alpha J}$. Ce calcul distingue la dépendance angulaire et la dépendance radiale. On peut en effet écrire :

$A_{\alpha J} = \sum_{n\ell} x_{n\ell}^{\alpha J} a_{n\ell}$, où les $a_{n\ell}$ sont des constantes électroniques tenant la partie radiale. Pour la partie angulaire (décrite par les coefficients $x_{n\ell}^{\alpha J}$), il suffit de calculer les éléments de matrice réduits $< \alpha J \| X^{(1)} \| \alpha' J >$, en tenant compte du couplage réel explicité préalablement dans l'étude des configurations. Des méthodes proposées récemment permettent de vérifier très simplement les matrices de coefficients $x_{n\ell}^{\alpha J}$ ainsi obtenues [52]. On a par ailleurs, pour les constantes de structure hyperfine électroniques [26],[51] :

$$a_{n\ell} = 2\beta\beta_N \mu_N \frac{1}{I} < \frac{1}{r^3} >_{n\ell} \qquad (\text{pour } \ell \neq 0)$$

$$a_{ns} = \frac{16\pi}{3} \beta\beta_N \mu_N \frac{1}{I} |\Psi_{ns}(0)|^2$$

Soit, pour un niveau $(n\ell j)$ d'un alcalin :

$$A_{n\ell j} = \frac{\ell(\ell+1)}{j(j+1)} a_{n\ell} \qquad (\ell \neq 0)$$

$$A_{ns1/2} = a_{ns} \cdot$$

L'évaluation théorique des constantes électroniques $a_{n\ell}$ et a_{ns} a été exposée en détail, notamment par Kopferman [26]. Elle résulte de raisonnements semi-empiriques suivant lesquels on aboutit pour les grandeurs radiales, aux expressions

$$|\Psi_{ns}(0)|^2 = Z.Z_a^2 \left(\frac{dn_a}{dn} \right) . \frac{1}{\pi a_o^3 n_o^3} \cdot F_r\left(\frac{1}{2} , Z \right)$$

$$< \frac{1}{r^3} >_{n\ell} = \frac{1}{\alpha^2 R_\infty a_o^3} \cdot \frac{1}{Z_i H_r(\ell, Z_i)} \zeta_{n\ell}$$

où : Z_a correspond au degré d'ionisation de l'atome, augmenté d'une unité (c'est aussi le numéro du spectre étudié)

Z_i un nombre correspondant à une valeur éffective de Z (on admet généralement $Z_i = Z - 4$ pour des électrons p , $Z_i = Z - 11$ pour des électrons d , mais le caractère très empirique de ces déterminations amène à prendre pour les électrons p des valeurs de Z_i situées entre $Z - 2,5$ et $Z - 6$ [53])

n_a le nombre quantique éffectif du niveau.

α la constante de structure fine.

R_∞ la constante de Rydberg.

$\zeta_{n\ell}$ la constante de couplage spin-orbite de l'électron $n\ell$.

F_r et H_r des corrections relativistes (tabulées); leur définition est est précisée en III-B-1.

On en tire, en particulier, la formule de Goudsmit-Fermi-Segrè :

$$a_{ns} = \frac{16}{3} \beta\beta_N \mu_N \frac{1}{I} \frac{Z}{n_a^3} \frac{Z_a^2}{a_o^3} \frac{dn_a}{dn} \cdot F_r(\tfrac{1}{2},Z).(1 - \delta)(1 - \varepsilon)$$

où $(1 - \delta)$: correction de Breit-Crawford-Schawlow due à l'extension de la charge nucléaire,

et $(1 - \varepsilon)$: correction due à la distribution de l'intensité d'aimantation nucléaire.

b) - Pour la partie électrique :

$$\Delta W^{(Q)}_{\alpha JF} = \langle (\alpha J, I) F M_F \, | H_Q | \, (\alpha J, I) F M_F \rangle$$

$$= \langle (\alpha J, I) F M_F \, | (Y^{(2)} . K^{(2)} | \, (\Delta J, I) F M_F \rangle$$

$$= (-1)^{J+I+F} \begin{Bmatrix} J & I & F \\ I & J & 2 \end{Bmatrix} \left[I(I+1)(2I+1)(2I-1)(2I+3) \right]^{1/2} \langle \alpha J \| Y^{(2)} \| \alpha J \rangle$$

Le développement du symbole 6j donne, de nouveau, la dépendance en F et la formule de Casimir correspondant à la partie quadrupolaire électrique :

$$\Delta W^{(Q)}_{\alpha JF} = B_{\alpha J} \cdot \frac{3C_F(C_F+1) - 4I(I+1)J(J+1)}{8I(2I-1)J(2J-1)}$$

(cette expression se déduit, ici encore, directement de la forme de l'opérateur éffectif $H_Q(\alpha J)$ donné précédemment) avec la constante de structure quadrupolaire du niveau (αJ) :

$$B_{\alpha J} = 2I(2I-1) \left[\frac{J(2J-1)}{(J+1)(2J+1)(2J+3)}\right]^{1/2} < \alpha J \,\|\, Y^{(2)} \|\, \alpha J >$$

(pour $I, J \geqslant 1$)

La partie radiale peut encore s'exprimer en fonction des constantes de structure quadrupolaire des électrons, on a :

$$b_{n\ell} = e^2 Q < \frac{1}{r^3} >_{n\ell} \qquad (\ell \neq 0)$$

et pour le niveau $(n\ell j)$ d'un alcalin : $B_{n\ell j} = \frac{2j-1}{2j+2} b_{n\ell}$.

III - A - 3 - Cas des configurations étudiées

Les configurations étudiées sont du type $np^5 n'\ell'$ où l'électron extérieur $n'\ell'$ est un électron s ou d pour les configurations impaires, un électron p pour les configurations paires. Le coeur np^5 est équivalent à un trou p ; or pour la structure hyperfine magnétique, trous et électrons conduisent à des résultats identiques, tandis que pour la structure électrique, les signes sont opposés [on a en effet pour un opérateur quelconque $w^{(\varkappa k)}$ (voir leur définition en III-B-1) la relation :

$$< \ell^n \alpha\, SL \| w^{(\varkappa k)} \| \ell^n \alpha' S'L' > = (-1)^{\varkappa+k+1} < \ell^{4\ell+2-n} \alpha\, SL \| w^{(\varkappa k)} \| \ell^{4\ell+2-n} \alpha' S'L' >$$

et, pour la structure magnétique $\varkappa + k$ est impair, pour la structure quadrupolaire $\varkappa + k$ est pair]. De plus, dans le cas du néon comme dans celui du xénon, la contribution à la structure hyperfine du trou np est largement prépondérante de-

vant celle des électrons externes, exception faite pour les électrons n's .

Le principe du calcul consiste à évaluer les constantes de structure hyperfine mesurées des niveaux, au moyen des constantes électroniques considérées comme des paramètres ajustables. On a donc 2 paramètres pour la structure magnétique a_{np^5} et $a_{n'\ell'}$, et 2 autres pour la structure quadrupolaire : b_{np^5} et $b_{n'\ell'}$ ($b_{n'\ell'}$ est évidemment nul s'il s'agit d'un électron s). Cependant, dans le spectre des gaz rares, les configurations sont très voisines et "interagissent" les unes avec les autres. Dans le calcul paramètrique des énergies des niveaux, nous avons tenu compte explicitement de ces interactions entre configurations proches (cf. Annexe II). Pour tenir compte de ces mêmes interactions dans la structure hyperfine, il est nécessaire d'introduire de nouveaux paramètre notés $a_{n'\ell'n''\ell''}$ ou $b_{n'\ell'n''\ell''}$, contenant des intégrales radiales de la forme :

$$\int_0^\infty R_{n'\ell'} \frac{1}{r^3} R_{n''\ell''} \, dr \ .$$

III - A - 4 - Cas du néon-21

Le nombre relativement limité de niveaux dont la structure hyperfine a été mesurée expérimentalement laisse la possibilité d'une étude paramétrique des résultats. Mais dans ce cas, il s'agit moins d'un test de qualité pour les fonctions d'onde déterminées par ailleurs, que d'une utilisation des paramètres hyperfins obtenus, à l'évaluation des effets pour les niveaux d'un assez grand nombre de configurations.

La perspective de futures mesures sur quelques uns de ces niveaux, confère un intérêt particulier à ces évaluations.

La structure hyperfine du spectre d'arc du néon-21 a été étudiée expérimentalement par divers auteurs. Les moments nucléaires obtenus sont :

$$I = 3/2 \qquad [54]$$

$$\mu_N = - 0{,}66176 \quad [55]$$

Des mesures très précises éffectuées par Grosof et coll. [56] avec une méthode de résonnance sur un jet atomique, donnent pour les constantes hyperfines du niveau métastable $3s[3/2]2$ les valeurs :

$$A_{\alpha J} = - 8,93 \text{ mK} \quad \text{et} \quad B_{\alpha J} = - 3,72 \text{ mK} .$$

La configuration $2p^5 3s$, assez isolée, est considérée comme pure; en outre le niveau $3s[3/2]2$ est seul de $J = 2$ (voir Annexe A-II-1-a). La valeur de $B_{\alpha J}$ pour ce niveau ne dépend donc que de la constante électronique correspondant au coeur $2p^5$ et permet sa détermination. On obtient ainsi :

$$b_{2p} = - 3,1 \text{ mK}$$

Les constantes $B_{\alpha J}$ des niveaux des configurations étudiées peuvent alors être calculées, si l'on convient de négliger la contribution des électrons extérieurs (cette hypothèse parait raisonnable, en effet : pour les configurations $2p^5 nd$ nous avons été amené à prendre pour la constante de couplage spin-orbite $\zeta_{nd} = 0$; dans le cas des configurations paires, l'erreur relative commise doit être du même ordre de grandeur que le rapport ζ_{np}/ζ_{2p} , soit au maximum pour la configuration $2p^5 3p$, de 1,5%).

En particulier, pour les 2 niveaux que nous avons étudiés, on calcule les valeurs de $B_{\alpha J}$ - qui sont faibles - ce qui permet d'extraire de nos mesures des valeurs probablement plus exactes pour les constantes $A_{\alpha J}$. On obtient les valeurs données dans le tableau 24

TABLEAU 24 (valeurs en mK)

Niveaux	$A_{\alpha J}$	$B_{\alpha J}$
$5s'[1/2]1$	- 23,8	- 0,46
$3d'[3/2]1$	+ 10,5	+ 0,21

Pour le niveau $3d'[3/2]1$, la contribution à $A_{\alpha J}$ de l'électron 3d est encore négligeable, on en déduit la constante électronique a_{2p} . Tenant compte de cette valeur, la constante $A_{\alpha J}$ du niveau $3s[3/2]2$ mesurée par Grosof et coll. [56], permet l'évaluation de la constante électronique a_{3s} . Les valeurs obtenues pour ces 2 paramètres électroniques sont données dans le tableau 25 , où elles sont comparées aux valeurs calculées au moyen des formules du paragraphe III-A-2-a .

TABLEAU 25 (valeurs en mK)

Paramètres	Valeurs exp.	Valeurs calc.
a_{2p}	- 17,18	- 17,82
a_{3s}	- 8,23	- 8,43
a_{4s}		- 1,97
a_{5s}		- 0,76

La valeur calculée de a_{2p} a été obtenue en utilisant pour ζ_{2p} la valeur 519 cm^{-1} (moyenne arithmétique des 8 valeurs de ζ_{2p} obtenues dans les 8 configurations étudiées (cf. Annexe A-II-1), l'écart quadratique moyen étant de $0,9cm^{-1}$), et pour Z_i la valeur empirique $Z_i = Z - 3 = 7$. L'accord entre les valeurs expérimentales et celles calculées dans cette approximation assez grossière est remarquablement bon.

La valeur expérimentale de a_{2p} permet une détermination de la valeur moyenne de $< 1/r^3 >_{2p}$. On obtient en unités atomiques : $< 1/r^3 >_{2p} = 12,12$. En utilisant cette valeur, on peut, à partir de b_{2p} , évaluer le moment quadrupolaire électrique du noyau; on obtient : $Q = 0,098b$, valeur très voisine d'une précédente détermination ($Q = 0,093b$ [57]).

Il est encore possible à partir des valeurs expérimentales de a_{2p} et b_{2p}, de déduire les constantes de structure hyperfine des niveaux du doublet correspondant au coeur $2p^5$, et de les comparer d'une part à celles que l'on peut calculer, d'autre part à celles déterminées par d'autres auteurs (voir tableau 26).

TABLEAU 26 Constantes hyperfines du niveau $^2P_{3/2}$ de $2p^5$

Constantes	Valeurs (en mK)		
	exp. (nos mesures)	calc.	exp. (autres auteurs [57])
$A(^2P_{3/2})$	- 9,16	- 9,38	- 9,2
$B(^2P_{3/2})$	- 3,72		- 3,8

Toutes ces valeurs sont remarquablement cohérentes entre elles.

Enfin, en utilisant les valeurs expérimentales de a_{2p}, a_{3s} et b_{2p}, ainsi que les valeurs calculées de a_{4s} et a_{5s}, nous pouvons calculer les constantes de structure hyperfine $A_{\alpha J}$ et $B_{\alpha J}$ des niveaux des 8 configurations que nous avons étudiées. Ces constantes sont données dans le tableau 27 ; les valeurs entre parenthèses rappellent les résultats expérimentaux de Rasmussen et coll. [57] (pour les configurations $2p^5 3s$ et $2p^5 3p$) et ceux que nous avons mesurés ($2p^5 3d$ et $2p^5 5s$).

TABLEAU 27 Constantes de structure hyperfine calculées du néon 21

Niveaux	$A_{\alpha J}$(mK)	$B_{\alpha J}$(mK)
3s [3/2]2	- 8,93 (- 9)	- 3,72 (- 4)
3s [3/2]1	- 14,49 (- 16)	+ 1,47 (+ 1)
3s'[1/2]1	- 21,93 (- 21)	- 3,33 (- 3)
4s [3/2]2	- 7,35	- 3,72
4s [3/2]1	- 10,73	- 0,59
4s'[1/2]1	- 24,07	- 1,27
5s [3/2]2	- 7,07	- 3,72
5s [3/2]1	- 10,99	- 1,40
5s'[1/2]1	- 23,40 (- 23,8)	- 0,46
3d [1/2]1	+ 2,69	+ 0,29
3d [7/2]4	- 3,44	- 3,72
3d [7/2]3	- 4,43	- 3,34
3d [3/2]2	- 0,72	+ 1,76
3d [3/2]1	+ 0,51	+ 0,62
3d [5/2]2	- 4,27	- 0,13
3d [5/2]3	- 3,04	- 0,13
3d'[5/2]2	- 10,39	+ 0,56
3d'[5/2]3	- 7,43	+ 0,68
3d'[3/2]2	+ 6,22	+ 0,47
3d'[3/2]1	+ 10,50 (+ 10,5)	+ 0,21

TABLEAU 27 (suite)

4d $[1/2]_1$	+ 2,05	+ 0,38
4d $[7/2]_4$	- 3,44	- 3,72
4d $[7/2]_3$	- 4,43	- 3,35
4d $[3/2]_2$	- 1,13	+ 2,04
4d $[3/2]_1$	+ 0,42	+ 0,65
4d $[5/2]_2$	- 4,08	+ 0,20
4d $[5/2]_3$	- 9,99	+ 0,29
4d' $[5/2]_2$	- 10,58	+ 0,22
4d' $[5/2]_3$	- 7,56	+ 0,27
4d' $[3/2]_2$	+ 6,63	+ 0,19
4d' $[3/2]_1$	+ 11,11	+ 0,08
3p $[1/2]_1$	- 2,15	- 0,003
3p $[5/2]_3$	- 4,58	- 3,72
3p $[5/2]_2$	- 7,05	- 3,91
3p $[3/2]_1$	- 13,90	- 1,82
3p $[3/2]_2$	- 6,21	- 2,31
3p' $[3/2]_1$	- 13,68 (- 15)	+ 1,44 (+ 1)
3p' $[3/2]_2$	- 9,64	+ 1,60
3p' $[1/2]_1$	+ 2,25 (+ 2,5)	+ 0,02 (0)

TABLEAU 27 (suite)

$4p\ [1/2]_1$	- 4,94	- 0,01
$4p\ [5/2]_3$	- 4,58	- 3,72
$4p\ [5/2]_2$	- 6,77	- 3,39
$4p\ [3/2]_1$	- 9,16	- 0,81
$4p\ [3/2]_2$	- 4,90	- 0,65
$4p'[3/2]_1$	- 18,74	+ 0,43
$4p'[3/2]_2$	- 11,23	+ 0,32
$4p'[1/2]_1$	+ 5,34	+ 0,02
$5p\ [1/2]_1$	- 6,50	- 0,04
$5p\ [5/2]_3$	- 4,58	- 3,72
$5p\ [5/2]_2$	- 6,78	- 3,52
$5p\ [3/2]_1$	- 8,56	- 0,50
$5p\ [3/2]_2$	- 4,75	- 0,31
$5p'[3/2]_1$	- 22,08	+ 0,08
$5p'[3/2]_2$	- 11,39	+ 0,11
$5p'[1/2]_1$	+ 9,17	+ 0,09

III - A - 5 - Cas du xénon 129

La structure hyperfine du xénon 129 a été étudiée expérimentalement par plusieurs auteurs, notamment A. Bohr et coll. (1952) [29] puis Faust et Mc Dermott (1961) [32]. Les résultats , obtenus avec des transitions visibles, concernent éssentiellement les configurations $5p^5 6s$ et $5p^5 6p$. Des mesures plus anciennes (1934) et moins précises, avaient été éffectuées d'une part par Kopferman et Rindal [58], d'autre part par G. Jones qui avait mesuré notamment des constantes de structure hyperfine de niveaux 7p [59]. Nos mesures [60][61] étendent les résultats expérimentaux aux niveaux de la configuration $5p^5 5d$. Ainsi, pour le xénon 129 contrairement au cas du néon 21, le nombre et la précision des mesures paraissent suffisants pour envisager une étude empirique assez complète, permettant à la fois d'évaluer lès constantes de niveaux non encore mesurées, et de juger de la qualité de l'étude des configurations.

Les moments nucléaires pour cet isotope sont connus avec précision, le spin nucléaire $I = 1/2$ impose l'absence de moment quadrupolaire, quant au moment magnétique sa valeur mesurée est (en magnétons nucléaires)

$$\mu_N = - 0{,}77255 \pm 0{,}00002 \quad [62]$$

(correction diamagnétique non éffectuée).

Notre étude paramètrique des énergies des niveaux [61] porte sur les configurations $5p^5(6p + 7p)$ et $5p^5(6s + 5d)$ (cf. Annexe II : A-II-2). Elle tient compte explicitement des interactions de ces configurations entre elles. La dépendance radiale des paramètres électroniques de structure hyperfine en $\langle 1/r^3 \rangle_{n\ell}$ est semblable à celle des constantes $\zeta_{n\ell}$ de couplage spin-orbite correspondantes. Il est ainsi possible, dans le cas des configurations paires, de réduire le nombre des paramètres de structure hyperfine libres en fixant les rapports :

$$\frac{a_{6p}}{a_{5p}} = \frac{\zeta_{6p}}{\zeta_{5p}} = p^2 \qquad \frac{a_{7p}}{a_{5p}} = \frac{\zeta_{7p}}{\zeta_{5p}} = p^2 q^2 \qquad \frac{a_{6p7p}}{a_{5p}} = \frac{\zeta_{6p7p}}{\zeta_{5p}} = p^2 q \ .$$

Le calcul éffectué dans ces conditions avec les constantes $A_{\alpha J}$ expérimentales des niveaux de la configuration $5p^5 6p$, montre un profond désaccord théorie-

expérience. Le paramètre a_{5p} se fixe à la valeur $a_{5p} = -131 \pm 10$ mK , et a_{6p} , laissé libre, n'a pas de sens (écart - type très supérieur à la valeur absolue du paramètre); en outre, l'écart quadratique moyen sur les 8 valeurs de $A_{\alpha J}$ de la configuration, est égal à 12 mK c'est à dire très supérieur aux incertitudes expérimentales. On peut penser à distinguer les niveaux construits sur le terme $^2P_{3/2}$ du coeur, de ceux construits sur le terme $^2P_{1/2}$. Ainsi, le même calcul, effectué séparément avec les constantes $A_{\alpha J}$ des niveaux construits sur chacun des 2 termes $^2P_{1/2,3/2}$ du coeur $5p^5$, donne un bien meilleur accord, mais alors les 2 valeurs obtenues pour a_{5p} diffèrent d'environ 50% , ce qui n'est pas admissible (voir tableau 28).

TABLEAU 28 (valeurs en mK)

Paramètres	Niveaux de $^2P_{3/2}$	Niveaux de $^2P_{1/2}$
a_{5p}	- 100 ± 1	- 133 ± 3
a_{6p}	- 8 ± 1,2	+ 5,5 ± 3
$\overline{\Delta A}$	0,3	3

De tels résultats montrent l'insuffisance du traitement théorique utilisé, et la nécessité d'un calcul plus raffiné tenant compte de corrections diverses. Parmi ces corrections, celles dues aux éffets relativistes jouent certainement un rôle important (les effets relativistes ont une influence notable dès $Z = 50$, ici $Z = 54$).

III - B - STRUCTURE HYPERFINE MAGNETIQUE ET CORRECTIONS RELATIVISTES

Les éffets relativistes n'étaient jusqu'ici pris en considération que dans les expressions de $a_{n\ell}$ et $b_{n\ell}$ (III - A - 2 - a), où ils avaient été introduits par Casimir dès 1936 [63]. L'étude de ces effets sur des systèmes à plusieurs élec-

trons est assez récente, elle a été développée d'abord par Sandars et Beck [64] puis Judd [5][65] dans les années 1963-1965. L'idée essentielle consiste à calculer un opérateur effectif agissant sur les fonctions d'onde d'états non -relativistes classiques, c'est à dire un opérateur $H_{eff.}$ tel que :

$$< \alpha\ SLJIFM_F\ |H_{eff}|\ \alpha'S'J'IF'M'_F > = < \alpha\ SLJIFM_F^R\ |H^R|\ \alpha'S'L'J'IF'M'^R_F >$$

(avec R pour relativiste).

Le détail de ces calculs est exposé dans plusieurs ouvrages ou publications, notamment par Judd [65]. Nous nous contenterons d'en donner le résultat.

III - B - 1 - Expression de l'hamiltonien effectif

L'opérateur s'exprime comme le produit par $I^{(1)}$ d'une combinaison linéaire d'opérateurs tensoriels doubles monoélectroniques de la forme $w^{(\kappa k)K} = (t^{(\kappa)}.v^{(k)})^{(K)}$, où $t^{(\kappa)}$ et $v^{(k)}$ agissent respectivement dans les espaces de spin et orbite, avec les éléments de matrices réduits : $< s \parallel t^{(\kappa)} \parallel s > = (2\kappa + 1)^{1/2}$

$$< \ell \parallel v^{(k)} \parallel \ell > = (2k + 1)^{1/2} .$$

$$H_\mu = X^{(1)}.I^{(1)}$$

avec pour un électron $n\ell$:

$$X^{(1)} = a(10)w^{(10)1} + a(01)w^{(01)1} + a(12)w^{(12)1}$$

Dans le cas de plusieurs électrons équivalents $n\ell^N$:

$$W^{(\kappa k)K} = \sum_i w_i^{(\kappa k)K} .$$

On obtient pour les coefficients $a(\nu k)$ les expressions :

$$a(10) = -\frac{2\beta_N \mu_N e}{I}\frac{2}{3}\left[\frac{2}{(2\ell+1)^3}\right]^{1/2}\left[(\ell+1)^2 P_{++} + \ell(\ell+1)P_{+-} + \ell^2 P_{--}\right]$$

$$a(01) = \frac{2\beta_N \mu_N e}{I}\left[\frac{2\ell(\ell+1)}{3(2\ell+1)^3}\right]^{1/2}\left[-2(\ell+1)P_{++} + P_{+-} + 2\ell\, P_{--}\right]$$

$$a(12) = \frac{2\beta_N \mu_N e}{3I}\left[\frac{\ell(\ell+1)}{(2\ell+1)^3(2\ell+3)(2\ell-1)}\right]^{1/2}\left[4(\ell+1)(2\ell-1)P_{++} - (2\ell-1)(2\ell+3)P_{+-} + 4\ell(2\ell+3)P_{--}\right]$$

Les coefficients P font intervenir les fonctions F_j et G_j de l'équation relativiste de Dirac; ainsi par exemple :

$$P_{++} = \int_0^\infty F_{\ell+1/2} \cdot G_{\ell+\frac{1}{2}} \cdot \frac{dr}{r^2}$$

Pour aller plus loin, Casimir a cherché une approximation raisonnable pour les fonctions F et G. Finalement les coefficients P, calculés par sa méthode, s'écrivent :

$$P_{++} = F_r\left(\ell + \tfrac{1}{2}, Z_i\right)\left[-\frac{\hbar\,\ell}{2mc}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle\right]$$

$$P_{+-} = G_r\left(\ell, Z_i\right)\left[\frac{\hbar}{2mc}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle\right]$$

$$P_{--} = F_r\left(\ell - \tfrac{1}{2}, Z_i\right)\left[\frac{\hbar(\ell+1)}{2mc}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle\right]$$

où les quantités F_r et G_r sont tabulées par Kopferman [26].

III - B - 2 - Calcul des énergies d'interaction magnétique

On a comme dans le cas classique :

$$\Delta W^{(\mu)}_{\alpha JF} = \langle (\alpha J,I)FM_F \; |H_\mu| \; (\alpha J,I)FM_F \rangle$$

$$= \langle (\alpha J,I)FM_F \; |X^{(1)}.I^{(1)}| \; (\alpha J,I)FM_F \rangle$$

La dépendance en F est évidemment inchangée, elle est toujours donnée par la formule de Casimir (III-A-2). La suite du calcul est formellement identique au cas classique.

On a, de plus, les relations d'équivalence entre opérateurs :

$$w^{(10)1} = \left[\frac{2}{2\ell+1} \right]^{1/2} . \, s^{(1)}$$

$$w^{(01)1} = \left[\frac{3}{2\ell(\ell+1)(2\ell+1)} \right]^{1/2} . \, \ell^{(1)}$$

$$w^{(12)1} = - \left[\frac{10(2\ell-1)(2\ell+3)}{\ell(\ell+1)(2\ell+1)} \right]^{1/2} (s^{(1)}.C^{(2)})^{(1)}$$

Ainsi la différence avec le cas non-relativiste tient d'une part dans l'intervention d'un terme de contact (dont l'influence doit être faible lorsque $\ell \neq 0$), d'autre part dans l'indépendance des effets de $\ell^{(1)}$ et $(s^{(1)}.C^{(2)})^{(1)}$. A la limite non relativiste, on retrouve, bien entendu, l'opérateur classique (cf.III-A-1-

On peut indifféremment utiliser les opérateurs de la forme $w^{(nk)1}$ ou leurs opérateurs équivalents. Nous avons choisi d'utiliser ces derniers.

III - B - 3 - Application au xénon - 129

Les configurations étudiées ne sont pas constituées d'électrons équivalents de sorte que l'hamiltonien éffectif s'écrit ici :

$$H_\mu = (X_1^{(1)} + X_2^{(1)}) . \, I^{(1)}$$

où $X_1^{(1)} = a^r_{5p}\, s_1^{(1)} + b^r_{5p}\, \ell_1^{(1)} - c^r_{5p} \sqrt{10}\, (s^{(1)}.C^{(2)})^{(1)}_1$ pour le "trou" 5p

et $X_2^{(1)} = a^r_{n\ell}\, s_2^{(1)} + b^r_{n\ell}\, \ell_2^{(1)} - c^r_{n\ell}\, 10\, (s^{(1)}.C^{(2)})^{(1)}_2$ pour l'électron externe $n\ell$.

[Note : l'exposant r rappelle qu'il s'agit du traitement relativiste, on évite ainsi la confusion avec les coefficients introduits dans le cas classique. Cependant, pour alléger quelque peu l'écriture, nous omettrons désormais de noter cet exposant r].

On a maintenant 3 paramètres indépendants par orbitale électronique, auxquels viennent s'ajouter 3 autres paramètres dûs à l'interaction entre les configurations: au total donc 12 paramètres. Pour réduire ce nombre de paramètres libres, dans le cas des configurations paires on impose des relations comme dans le calcul classique, soit :

$$\frac{a_{6p}}{a_{5p}} = \frac{b_{6p}}{b_{5p}} = \frac{c_{6p}}{c_{5p}}\, p^2$$

$$\frac{a_{7p}}{a_{5p}} = \frac{b_{7p}}{b_{5p}} = \frac{c_{7p}}{c_{5p}} = p^2\, q^2$$

$$\frac{a_{6p7p}}{a_{5p}} = \frac{b_{6p7p}}{b_{5p}} = \frac{c_{6p7p}}{c_{5p}} = p^2\, q$$

Le nombre des paramètres libres est alors ramené à 3 : a_{5p} , b_{5p} et c_{5p} .

Pour les configurations impaires, l'étude de la structure fine conduit à une valeur nulle pour ζ_{5d} (cf. Annexe A-II-2-a), celà signifie que l'électron 5d passe très peu de temps près du noyau, de sorte que les paramètres de structure hyperfine pour l'orbitale 5d peuvent être raisonnablement négligés, de même que le paramètre c_{6s5d} dû à l'interaction entre les configurations 6s et 5d (a_{6s5d} et b_{6s5d} sont nuls). Le nombre des paramètres libres pour ces 2 configurations se

TABLEAU 30 (Valeurs en mK)

Niveaux	$A_{\alpha J}$ exp. [60]	[29]	[30]	$A_{\alpha J}$ calc.
6p [1/2]1	- 46,6	- 46		- 46,4
6p [5/2]2	- 45,1	- 44,8	- 46	- 46,1
6p [5/2]3		- 28,97	- 29,5	- 28,9
6p [3/2]1	- 44	- 42,67	- 44,2	- 43,9
6p [3/2]2	- 30	- 29,32	- 29,9	- 29,6
6p'[3/2]1		- 149,1	- 147,5	- 150,4
6p'[3/2]2		- 96,64	- 96,8	- 96,9
6p'[1/2]1		+ 66,0	+ 65,8	+ 65,7
		[59]		
7p [1/2]1		- 51	- 42,8	- 39,7
7p [5/2]2		- 42	- 44,5	- 42,7
7p [5/2]3		- 22	- 28,2	- 27,4
7p [3/2]1		- 89	- 90,9	- 87,9
7p [3/2]2		- 30	- 31,8	- 32,8

Nous avons utilisé, pour la détermination des paramètres, les 8 valeurs expérimentales des constantes $A_{\alpha J}$ de la configuration $5p^5 6p$: 4 tirées de nos mesures [60] (1ere colonne), les 4 autres des mesures de A. Bohr et coll. [29] (2e colonne). L'écart quadratique moyen sur l'ensemble de ces valeurs est de 0,7 mK . Nous donnons en colonne 3 les valeurs expérimentales obtenues récemment par D.A. Jackson et M. Coulombe [30] avec des raies visibles, au moyen d'un dispositif spectrométrique à haute résolution et enregistrement photographique, sur les niveaux

6p et 7p . Les paramètres obtenus (tableau 29) permettent de calculer les constantes $A_{\alpha J}$ des niveaux de la configuration 7p . La comparaison de ces valeurs calculées avec les seules valeurs expérimentales dont nous disposions [59] était peu satisfaisante, en particulier pour les niveaux $7p[1/2]1$ et $7p[5/2]3$. Il s'agissait toutefois de mesures assez anciennes, faites par G. Jones (en 1934), dont la précision ne paraît plus suffisante aujourd'hui. Les mesures de D.A. Jackson et M. Coulombe sur les niveaux de cette configuration, donnent des résultats très proches cette fois, des valeurs calculées (écart-quadratique moyen sur les niveaux 7p seuls : 2 mK).

b) - Configurations impaires $5p^5(6s + 5d)$

Les valeurs des paramètres électroniques de la structure magnétique ont été calculées en utilisant les constantes expérimentales $A_{\alpha J}$ des niveaux des 2 configurations. Pour le niveau $6s[3/2]2$, métastable, de la configuration 6s , la valeur de $A_{\alpha J}$ est tirée d'une mesure très précise effectuée par W.L. Faust et M.N.Mc Dermott[32]; les constantes $A_{\alpha J}$ correspondant aux 2 autres niveaux 6s , sont, elles, tirées de mesures optiques faites par A. Bohr et coll. [29].

Les valeurs des paramètres sont données dans le tableau 31.

TABLEAU 31 (Valeurs en mK)

Paramètres	Valeurs
a_{5p}	fixé à 0
b_{5p}	- 117,7 ± 2,7
c_{5p}	- 166,0 ± 6
a_{6s}	- 155,2 ± 8

Le paramètre a_{5p} a été fixé à zéro pour la même raison que précedemment (cf. III-B-3-a) dans le cas des configurations paires.

Le tableau 32 donne les valeurs expérimentales et calculées des constantes $A_{\alpha J}$ des niveaux des configurations 6s et 5d .

Les écarts-types sur les paramètres (tableau 31) sont plus élevés que dans le cas des configurations paires, de même que l'écart quadratique moyen sur les constantes $A_{\alpha J}$ qui vaut ici 3,3 mK . Les résultats concernant les configurations impaires 6s et 5d sont donc un peu moins précis que ceux des configurations paires 6p et 7p . Celà n'est pas étonnant : l'étude des configurations (voir Annexe A-II-2) montre déjà une précision moindre pour les configurations impaires. Encore faut-il remarquer que l'introduction, dans cette étude, du paramètre $\bar{\alpha}$ qui prend en compte de manière éffective la plus grande part des éffets d'interactions de configurations lointaines, améliore notablement la qualité des résultats (amélioration que l'on "mesure" par l'abaissement des écarts-types sur les paramètres, de l'écart quadratique moyen sur les énergies), et conduit certainement à de meilleurs vecteurs propres (l'effet immédiat consistant en une amélioration des valeurs des facteurs de Landé $g_{\alpha J}$ des niveaux); en définitive l'écart quadratique moyen sur les constantes $A_{\alpha J}$ est aussi diminué.

TABLEAU 32 (Valeurs en mK)

Niveaux	$A_{\alpha J}$ exp.			$A_{\alpha J}$ calc.
	[61]		[30]	
6s [3/2]1		- 32,1 [29]	- 32,5	- 32,5
6s [3/2]2		- 79,54 [32]	- 79,8	- 79,8
6s'[1/2]1		- 193,1 [29]	- 193,2	- 194,3
5d [1/2]1	- 80,7			- 75,7
5d [7/2]4	- 19,4			- 21,1
5d [7/2]3	- 29,0			- 28,5
5d [3/2]2	0			- 4,9
5d [3/2]1				+ 20,1
5d [5/2]2	- 27,6	- 27,65 [31]		- 26,5

TABLEAU 32 (suite)

5d [5/2]3	- 15,8			- 16,9
5d'[3/2]2				+ 52
5d'[3/2]1				+ 91,7
5d'[5/2]2	- 88,7			- 86,2
5d'[5/2]3	- 57,2			- 62,3

c) - Discussion des résultats

Pour le paramètre a_{6s} , il est possible de comparer la valeur obtenue, à celle qu'on peut déterminer par la formule de Goudsmit-Fermi-Segré (cf. III-A-2-a), ainsi qu'aux valeurs obtenues par d'autres auteurs (voir tableau 33)

TABLEAU 33 (Valeurs en mK)

Référence	[61]	[32]	[29]	G.F.S.
a_{6s}	- 155,2 ± 8	- 149,7 ± 7,5	- 156,0	- 148,1

Ces valeurs sont toutes compatibles compte tenu des incertitudes. Il est assez simple, à partir des paramètres b_{5p} et c_{5p} , d'évaluer les constantes de structure hyperfine des termes $^2P_{3/2}$ et $^2P_{1/2}$ du coeur $5p^5$. On peut montrer en effet qu'on a les relations :

$$A(^2P_{3/2}) = 2/3\ b_{5p} - 2/15\ c_{5p}$$

$$A(^2P_{1/2}) = 4/3\ b_{5p} + 4/3\ c_{5p}$$

Les constantes A que nous calculons ainsi, peuvent alors être comparées à celles déterminées par d'autres auteurs (tableau 34).

TABLEAU 34(Valeurs en mK)

	$5p^5(6p + 7p)$	$5p^5(6s + 5d)$	[32]	[29]
$A(^2P_{3/2})$	- 54,9 ± 0,6	- 56,3 ± 2,6	- 56,0 ± 2,8	- 53,8
$A(^2P_{1/2})$	- 403,4 ± 2,4	- 378,3 ± 11,6		- 334,8

On peut remarquer les valeurs notablement différentes obtenues dans les configurations paires et impaires pour $A(^2P_{1/2})$.

Les expressions littérales données en III-B-1 pour les paramètres électroniques, permettent de calculer des rapports entre ces paramètres. On obtient en particulier :

$$a_{5p} / b_{5p} = - 0,04$$

ce qui montre que la contribution du terme de contact à la structure hyperfine, pour l'électron 5p , peut être raisonnablement négligée devant les autres contributions. Ce fait explique que nous n'ayons pas obtenu de valeur significative pour a_{5p} . On peut, en outre, calculer la valeur du rapport c_{5p} / b_{5p} à partir des expressions littérales, et comparer cette valeur à celles calculées à partir des paramètres expérimentaux (tableau 35).

TABLEAU 35

	Expressions littérales		Paramètres expérimentaux	
	Cas classique	Cas relativiste	$5p^5(6p + 7p)$	$5p^5(6s + 5d)$
c_{5p} / b_{5p}	1	1,22	1,54	1,41

Les valeurs expérimentales diffèrent notablement de la valeur calculée 1,22. Bien que cette dernière valeur résulte de théories souvent très approchées, il est

difficile d'imaginer qu'un calcul théorique plus rigoureux permette de rendre compte de telles différences.

Ces valeurs montrent que les corrections relativistes, malgré leur importance, ne sont pas seules prises en compte dans nos calculs et qu'il s'y ajoute d'autres corrections dont la nature sera discutée plus précisément à la fin de ce chapitre (cf. III-D).

III - C - STRUCTURE HYPERFINE QUADRUPOLAIRE ET CORRECTIONS RELATIVISTES

III - C - 1 - Expression de l'hamiltonien

L'opérateurpeut s'écrire sous la forme :

$$H_Q = Y^{(2)} \cdot K^{(2)}$$

où $$K^{(2)} = 3/2 \{I^{(1)} \cdot I^{(1)}\}^{(2)}$$

$$Y^{(2)} = \sum_i b_i(11) w_i^{(11)2} + b_i(13) w^{(13)2} + b_i(02) w_i^{(02)2}$$

la somme étant étendue aux électrons i .

Seul, ici, l'opérateur $w^{(02)2}$ est lié à un opérateur classique $C^{(2)}$, par la relation :

$$w^{(02)2} = - \left[\frac{5(2\ell-1)(2\ell+3)}{2\ell(\ell+1)(2\ell+1)}\right]^{1/2} \cdot C^{(2)}$$

A la limite non relativiste, les coefficients $b(11)$ et $b(13)$ s'annulent tandis que $b(02) w^{(02)2} \longrightarrow - \frac{e^2 Q}{I(2I-1)} C^{(2)} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$.

On a en effet pour les coefficients $b(\varkappa k)$ les expressions :

$$b(11) = -\frac{e^2 Q}{I(2I-1)}\left[\frac{4\ell(\ell+1)}{25(2\ell+1)^3}\right]^{1/2}\left[-(\ell+2)R_{++} + 3R_{+-} + (\ell-1)R_{--}\right]$$

$$b(13) = -\frac{e^2 Q}{I(2I-1)}\left[\frac{6(\ell-1)\ell(\ell+1)(\ell+2)}{25(2\ell-1)(2\ell+1)^3(2\ell+3)}\right]^{1/2}\left[(2\ell-1)R_{++} + 4R_{+-} - (2\ell+3)R_{--}\right]$$

$$b(02) = +\frac{e^2 Q}{I(2I-1)}\left[\frac{2\ell(\ell+1)}{5(2\ell-1)(2\ell+1)^3(2\ell+3)}\right]^{1/2}\left[(2\ell-1)(\ell+2)R_{++} + 6R_{+-} + (\ell-1)(2\ell+3)R_{--}\right]$$

dans lesquelles les intégrales R, qui contiennent la dépendance radiale, font intervenir les fonctions F_j et G_j de l'équation relativiste de Dirac. On a par exemple :

$$R_{++} = \int_0^\infty \left(F^2_{\ell+\frac{1}{2}} + G^2_{\ell+\frac{1}{2}}\right)\frac{dr}{r^3}$$

Un calcul analogue à celui développé pour les intégrales P de la structure magnétique (cf. III-B-1), conduit pour les intégrales R aux expressions :

$$R_{++} = R_+ \cdot \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \qquad \text{pour} \quad j = \ell + \tfrac{1}{2}$$

$$R_{--} = R_- \cdot \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \qquad \text{pour} \quad j = \ell - \tfrac{1}{2}$$

$$R_{+-} = S \cdot \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$$

Les facteurs de corrections de Casimir R_+, R_- et S sont tabulés [26].

III - C - 2 - Calcul des énergies d'interaction quadrupolaire

On a : $\Delta W^{(Q)}_{\alpha JF} = \langle (\alpha J, I) F M_F \; |H_Q| \; (\alpha J, I) F M_F \rangle$

$= \langle (\alpha J, I) F M_F \; |Y^{(2)} \cdot K^{(2)}| \; (\alpha J, I) F M_F \rangle$

La dépendance en F demeure evidemment inchangée, et est encore donnée par la formule de Casimir.

III - C - 3 - Application au xénon - 131

Le spin nucléaire de cet isotope est $I = 3/2$. Le noyau présente un moment quadrupolaire qui a été évalué par plusieurs auteurs à $Q = 0,120 \pm 0,012b$ [29] [32]. D'autre part, le rapport des moments magnétiques nucléaires μ_{129} / μ_{131}, mesuré avec précision, conduit à la valeur :

$$\mu_{131} = + 0,68680 \pm 0,00002 \text{ [33]}$$

(correction diamagnétique non éffectuée).

L'opérateur d'interaction quadrupolaire est ici de la forme :

$$H_Q = (Y_1^{(2)} + Y_2^{(2)}).K^{(2)}$$

où :
$$Y_1^{(2)} = b_{5p}(11)w_1^{(11)2} + b_{5p}(02)w_1^{(02)2} \quad \text{pour le "trou 5p"}$$

$$Y_2^{(2)} = b_{n\ell}(11)w_2^{(11)2} + b_{n\ell}(13)w_2^{(13)2} + b_{n\ell}(02)w_2^{(02)2}$$

pour l'électron externe $n\ell$.

Quelques simplifications viennent de ce que, pour les électrons p , le terme dû à $w^{(13)2}$ est nul; en outre pour ces mêmes électrons l'intégrale R_{--} n'intervient pas. Pour des électrons s , il n'y a évidemment pas de contribution à la structure quadrupolaire. Pour des électrons d , il faudrait tenir compte de leur contribution, mais la valeur nulle de ζ_{5d} donnée dans l'étude de la structure fine (cf. Annexe A-II-2), conduit à négliger cette contribution de l'électron extérieur 5d . Enfin pour les configurations paires, on peut encore fixer les rapports $b_{np}(\varkappa k)/b_{5p}(\varkappa k)$, aux valeurs déterminées dans l'étude des configurations. Au total donc, pour les configurations paires ou impaires, seuls subsistent comme paramètres libres :

$$b_{5p}(02) \quad \text{et} \quad b_{5p}(11)$$

Résultats du calcul.

a) - Configurations paires $5p^5(6p + 7p)$

Les valeurs que nous avons obtenues pour les paramètres sont données dans le tableau 36 . Nous utilisons pour les calculer les constantes expérimentales $B_{\alpha J}$ que nous avons mesurées pour 4 niveaux de la configuration $5p^5 6p$ (voir tableau 37).

TABLEAU 36 (Valeurs en mK)

Paramètres	5p	6p	7p	6p7p
b(02)	- 6,48 ± 0,4	- 0,33	- 0,08	- 0,17
b(11)	+ 1,16 ± 0,3	0	0	0

Les valeurs expérimentales et calculées des constantes $B_{\alpha J}$ pour les niveaux des configurations $5p^5(6p + 7p)$ sont données dans le tableau 37.

TABLEAU 37 (Valeurs en mK)

Niveaux	$B_{\alpha J}$ exp.			$B_{\alpha J}$ calc.
	nos mesures	[29]	[66]	
6p [1/2]1	1,04	0	0,98	1,1
6p [5/2]2	8,0	9		8,0
6p [5/2]3		7,1		8,3
6p [3/2]1	0,2	1,5		$0,2_4$
6p [3/2]2	1,0	1,2		0,9
6p'[3/2]1		0,8	0,54	0,8
6p'[3/2]2		- 1,5		- 0,4
6p'[1/2]1		- 0,3		- 0,2

TABLEAU 37 (suite)

7p [1/2]1				$0,3_5$
7p [5/2]2				7,9
7p [5/2]3				8,4
7p [3/2]1				- 0,5
7p [3/2]2				0,4

L'écart quadratique moyen (calculé avec nos valeurs expérimentales et celles de A. Bohr et coll. [29] pour les niveaux que nous n'avons pas mesurés) est de 0,6 mK , soit l'ordre de grandeur de l'incertitude expérimentale moyenne.

b) - Configurations impaires $5p^5(6s + 5d)$

Les valeurs calculées des paramètres sont ici (en mK) :

$$b_{5p}(02) = -\ 5,6_5 \pm 0,5$$

$$b_{5p}(11) = +\ 0,9 \pm 0,4$$

Nous utilisons pour les calculer, la valeur de $B_{\alpha J}$ mesurée très précisément par Faust et Mc Dermott [32] sur le niveau $6s[3/2]2$, ainsi que 2 des valeurs que nous avons mesurées (niveaux $5d[1/2]1$ et $5d[3/2]2$. Voir tableau 38).

Les constantes $B_{\alpha J}$ expérimentales et calculées des niveaux de ces configurations sont données dans le tableau 38 .

TABLEAU 38 (Valeurs en mK)

Niveaux	$B_{\alpha J}$ exp. nos mesures	[29]	autres	$B_{\alpha J}$ calc.
6s [3/2]1		3		3
6s [3/2]2			8,42 [32]	8,38
6s'[1/2]1		1,3	0,8 [66]	1,24

TABLEAU 38 (suite)

5d [1/2]1	- 1,1			- 1,37
5d [7/2]4				7,53
5d [7/2]3				7,58
5d [3/2]2	- 2,84			- 2,74
5d [3/2]1				- 0,73
5d [5/2]2	$1,3_4$			1,22
5d [5/2]3				- 0,89
5d'[3/2]2				- 1,68
5d'[3/2]1				- 0,14
5d'[5/2]2				- 2,08
5d'[5/2]3				- 1,04

L'écart quadratique moyen est égal à 0,13 mK ,soit une valeur en deçà de l'incertitude expérimentale moyenne.

c) - Discussion des résultats

On peut déterminer à partir des paramètres électroniques, les constantes de la structure quadrupolaire des termes ^2P_j du coeur $5p^5$. On obtient la relation:

$$B(^2P_{3/2}) = -\frac{5}{2\sqrt{3}} b_{5p}(02)$$

Soit, en comparant avec les valeurs déterminées par d'autres auteurs :

TABLEAU 39 (Valeurs en mK)

	$5p^5(6p + 7p)$	$5p^5(6s + 5d)$	[32]	[29]
$B(^2P_{3/2})$	$9,3_5$	$8,1_6$	8,42	8,3
$b(^2P_{3/2})$	- 0,5			- 0,6

Ici encore nous pouvons remarquer les valeurs différentes obtenues suivant les configurations; cependant, la comparaison avec des valeurs données par d'autres auteurs est satisfaisante.

Enfin, on peut calculer le rapport $b_{5p}(11) / b_{5p}(02)$ au moyen des expressions données en III-C-1, et comparer cette valeur à celles qu'on obtient à partir des valeurs expérimentales (tableau 40)

TABLEAU 40

	Valeurs calculées		Valeurs expérimentales	
	Classique	Relativiste	$5p^5(6p + 7p)$	$5p^5(6s + 5d)$
$b_{5p}(11)/b_{5p}(02)$	0	- 0,038	- 0,18	- 0,16

Les valeurs obtenues à partir de résultats expérimentaux sont nettement plus élevées que la valeur faible prévue par le calcul : - 0,038 . Cependant, les conclusions ne peuvent pas être bien nettes, en raison d'une part de la grande incertitude relative à la détermination de $b_{5p}(11)$ par voie expérimentale, d'autre part du caractère approximatif des calculs qui conduisent à l'expression théorique des coefficients $b(nk)$. On peut néanmoins penser que des corrections autres que les seules corrections relativistes, sont prises en compte dans notre calcul.

III - D - EFFETS DES INTERACTIONS DE CONFIGURATIONS LOINTAINES

Les interactions de configurations proches ont été explicitement considérées dans l'étude empirique des énergies des niveaux, de même qu'une partie éffective des interactions de configurations lointaines (cf. Annexe II). Les vecteurs propres des niveaux, déterminés à l'issue de cette étude , tiennent évidemment compte de ces effets. D'autre part, l'étude paramètrique de la structure hyperfine, prenant en considération les effets relativistes, conduit à des résultats remarquablement cohérents : les écarts-types sur les paramètres importants sont petits, de même que les écarts quadratiques moyens sur les constantes de structure hyperfine des niveaux. Cependant, certaines constantes électroniques ainsi obtenues diffèrent notablement des valeurs qu'on peut en calculer a priori; nous avons traduit ces différences en comparant notamment les valeurs expérimentales et calculées du rapport c_{5p}/b_{5p} (cf. III-B-3 - Tableau 35). On peut alors, pour poursuivre l'analyse des résultats, envisager les éffets des interactions de configurations lointaines au 2e ordre de perturbation sur la structure hyperfine. Ainsi, pour la partie de ce second ordre due à l'interaction électrostatique, la contribution à l'énergie de structure hyperfine est de la forme :

$$\Delta W^{(2)}_{\alpha JF} = 2 \sum_{X'} \frac{\langle \alpha JIFM_F | H_\mu + H_Q | X' \rangle \langle X' | G | \alpha JIFM_F \rangle}{E_c - E_{c'}}$$

en appelant c et c' respectivement les configurations perturbée et perturbatrice, E_c et $E_{c'}$ les énergies à l'ordre zéro du champ central, X' un état de c' et G l'opérateur hamiltonien de l'interaction coulombienne. La forme des opérateurs H_μ et H_Q impose que c et c' ne diffèrent pas de plus d'un électron pour que l'élément de matrice $\langle \alpha JIFM_F | H_\mu + H_Q | X' \rangle$ ne soit pas nul.

Jusqu'ici, seules les configurations d'électrons équivalent ($c \equiv n\ell^N$) ont été étudiées théoriquement par divers auteurs, en particulier B.R. Judd [67]. Or, dans le cas de Xe I , les configurations sont de la forme $n\ell^N n''\ell''$ (avec $n\ell^N \equiv 5p^5$). Néanmoins, si dans l'expression l'élément de matrice $(X'|G|\alpha JIFM_F)$, on ne retient que les intégrales d'énergie ne faisant pas intervenir l'électron $n''\ell''$, on obtient pour les paramètres $a_{n\ell}$, $b_{n\ell}$ et $c_{n\ell}$ précisément les mêmes corrections (litté-

rales) que dans la configuration $n\ell^N$. Nous allons donc étudier ces corrections plus en détail et négliger le reliquat.

III - D - 1 - Principe du calcul

Le principe du calcul, dans le cas des configurations $c = n\ell^N$, consiste à remplacer les opérateurs $w^{(nk)K}$ de la structure hyperfine par des opérateurs effectifs de la forme [67]

$$w^{(nk)K} + X^{(nk)K}$$

l'opérateur $X^{(nk)K}$ agissant uniquement à l'intérieur de la couche $n\ell$. La forme générale de cet opérateur a été précisée par plusieurs travaux [67] [68] [69], elle fait intervenir des opérateurs tensoriels doubles à 1 et 2 particules.

III - D - 2 - Classification des effets

Pour procéder à une classification des éffets, envisageons plus particulièrement le cas de Xe I , pour lequel $c \equiv n\ell^N \equiv 5p^5$. Le coeur $5p^5$ se comporte comme un "trou 5p" , en conséquence tout effet de 2e ordre sera équivalent à une modification des intégrales de structure hyperfine et en particulier des valeurs moyennes de $< 1/r^3 >$. Les excitations peuvent être classées suivant les effets qu'elles produisent pour les différents opérateurs.

Ainsi dans la plupart des cas, le résultat s'exprime comme :

$$(1 + \Delta_{nk}) < 1/r^3 > \quad [\text{ pour } (nk) = (01),(12) \text{ ou } (02)]$$

a) - Excitations efficaces pour le terme de contact

L'opérateur interessé est ici $w_{5p}^{(10)1}$, et le paramètre correspondant a_{5p} . Les configurations c' qui donnent lieu à une interaction dans ce cas, se déduisent de c par l'excitation d'un électron s des couches complètes vers une orbitale s' des couches vides. Le résultat de ces interactions constitue le phénomène de polarisation du coeur. Le calcul théorique de la contribution correspondante a été traité par J. Bauche et B.R. Judd [70]. Dans le cas de Xe I , a_{5p} n'ayant pas pu être déterminé, cette correction n'a pu être évaluée.

b) - Excitations éfficaces pour les opérateurs $w^{(12)1}$ et $w^{(02)2}$

Dans le cas de Xe I , les excitations à envisager sont assez nombreuses. L'expression théorique des corrections qu'elles introduisent a été donnée par B.R. Judd [69] et Cl. Bauche-Arnoult [68]. Le tableau 41 résume les différents types d'excitation possibles.

TABLEAU 41

Electron du coeur		Electron excité
ns	→	n'd
nd	→	n's
nd	→	n'g
np	→	n'f
5p	→	n'f

L'effet de ces excitations se traduit par une correction de l'intégrale $<1/r^3>$. A titre d'exemple, nous donnons le résultat du calcul pour les excitations du type ns → n'd , les corrections étant notées : $(1 + \xi) <1/r^3>$.

- Pour $w^{(12)1}$: $\xi_{(12)} = \frac{2}{3} \sum_{n,n'} \frac{(ns|r^{-3}|n'd)\ R^1(5p\ ns,n'd\ 5p)}{(5p|r^{-3}|5p)\ W(ns,n'd)}$

- Pour $w^{(02)2}$: $\xi_{(02)} = \frac{2}{15} \sum_{n,n'} \frac{(ns|r^{-3}|n'd)[5R^1(5p\ ns,n'd\ 5p)-6R^2(5pns,5pn'd)]}{(5p|r^{-3}|5p)\ W(ns,n'd)}$

On peut remarquer qu'une partie des corrections est commune aux 2 expressions.

c) - Excitations éfficaces pour les opérateurs $w^{(01)1}$, $w^{(12)1}$ et $w^{(02)2}$

Dans le cas de Xe I , on peut dénombrer 4 types d'excitations (voir tableau 42). Les corrections correspondantes ont été exprimées théoriquement [67][68][69].

TABLEAU 42

Electron du coeur		Electron excité	
nd	→	n'd	
np	→	n'p	(avec $n < 5$ et $n' > 6$)
5p	→	n'p	(avec $n' > 6$)
np	→	5p	(avec $n < 5$)

III - D - 3 - Conclusions

On regroupe généralement les effets des excitations agissant sur l'opérateur de structure quadrupolaire $w^{(02)2}$ sous le nom d'effet Sternheimer.

La forme des corrections étudiées rend difficile une évaluation des effets : dans la plupart des cas il est nécessaire de faire une somme sur une infinité de niveaux excités situés dans le continuum . Toutefois, l'analyse faite dans le paragraphe précédent permet de comprendre, au moins qualitativement, le fait que $(c_{5p}/b_{5p})_{exp.} > 1,22$ (valeur calculée en tenant compte des seules corrections relativistes). Cette analyse ne permet pas d'interpréter la différence entre les rapports $(c_{5p}/b_{5p})_{exp.}$ obtenus pour les configurations paires et pour les configurations impaires (cf. III- Tabl.35). Une certaine forme d'interaction, due à la configuration $5p^4 6p^2$ (obtenue par l'excitation d'un électron 5p vers une orbitale 6p) et traité par des opérateurs à 2 et 3 particules, pourrait donner une contribution pour la configuration $5p^5 6p$, dont il n'y a pas l'analogue pour la configuration $5p^5 5d$. Cet exemple montre que le cas des configurations $n\ell^N\ n''\ell''$ doit être étudié plus explicitement; en effet, les interactions avec des configurations lointaines obtenues par excitation de l'électron extérieur $n''\ell''$, donnent pour les opérateurs à 2 particules une contribution qui est certainement différente pour les configurations paires et les configurations impaires. Rien n'indique cependant, que les effets ainsi calculés rendent compte de la totalité de l'écart important observé.

L'interprétation de la structure quadrupolaire met en évidence un effet de l'opérateur $w_{5p}^{(11)2}$ plus grand que celui qu'on peut calculer (cf. III tableau 40).

Les corrections de 2e ordre analysées précédemment n'ont aucun effet sur $w_{5p}^{(11)2}$ car les opérateurs de l'interaction électrostatique G n'agissent pas sur les variables de spin. Ce résultat nécessiterait donc l'introduction de nouvelles corrections de 2e ordre, dues cette fois au couplage spin-orbite. En effet, si dans les cas étudiés jusqu'ici, de configurations $n\ell^N$, on avait à juste raison considéré cette contribution comme négligeable, pour le Xe I , l'étude de la structure fine a montré l'importance du rôle joué par le couplage spin-orbite (cf. Annexe A-II- 2 -).

Enfin, certains paramètres électroniques de structure hyperfine (relatifs à l'électron 5p) déterminés expérimentalement, prennent des valeurs différentes dans les configurations 6p et 5d de Xe I . On obtient en particulier les rapports suivants :

$$\frac{[\zeta_{5p}]_{6p}}{[\zeta_{5p}]_{5d}} = 1 \qquad \frac{[c_{5p}]_{6p}}{[c_{5p}]_{5d}} = 1{,}13$$

$$\frac{[b_{5p}]_{6p}}{[b_{5p}]_{5d}} \simeq 1 \qquad \frac{[b_{5p}(02)]_{6p}}{[b_{5p}(02)]_{5d}} = 1{,}14$$

La similitude des valeurs obtenues pour ces rapports est assez remarquable. Nous n'en donnons aucune interprétation, mais nous pouvons rappeler que d'autres auteurs ont déjà mis en évidence de telles similitudes, notamment Judd (toujours pour des configurations $n\ell^N$) en ce qui concerne les opérateurs $\ell^{(1)}$ et $(s^{(1)}\ \ell^{(1)})^0$ [69], et Kelly en ce qui concerne les opérateurs $(s^{(1)}\ C^{(2)})^1$ et $C^{(2)}$ [71].

Nous n'avons qu'éffleuré ici l'étude des éffets des interactions de configurations lointaines sur la structure hyperfine, au moyen de considérations purement qualitatives. Mais le cas du xénon paraît assez typique pour justifier une étude

systématique approfondie mettant l'accent d'une part, sur les corrections de 2e ordre de couplage spin orbite et structure hyperfine "croisés", d'autre part sur le problème plus général des corrections de 2e ordre de structure hyperfine dans le cas des configurations $n\ell^N\ n''\ell''$.

CONCLUSION

Les résultats exposés au cours du présent travail sont, dans une première partie, de caractère purement expérimental; ils intéressent la recherche de raies laser nouvelles et l'étude spectrométrique à très haute résolution de ces raies, en vue de la mesure de leur structure hyperfine ou isotopique.

Dans la seconde partie, plus théorique, nous avons présenté une tentative d'interprétation des grandeurs mesurées qui, dans certains cas, n'a pu aboutir que grâce à l'emploi des techniques de calcul les plus récentes.

La mise en oeuvre du grand laser, et son fonctionnement dans des conditions aussi variées que possible quant à l'excitation et à la pression du gaz étudié, ont permis d'observer l'oscillation de nouvelles transitions stimulées. La recherche des conditions typiques d'oscillation pour une transition déterminée, est toutefois demeurée très empirique et pourrait faire l'objet d'une étude plus systématique (il conviendrait de faire varier de nouveaux paramètres par exemple utiliser des tubes à décharge de diamètres intérieurs différents, introduire de nouveaux gaz d'appoint, fermer la cavité par des miroirs très réflecteurs et très sélectifs etc...). Cependant, le gain qu'on peut en attendre en nombre de transitions nouvelles ne doit pas être très élevé en ce qui concerne les gaz rares. Par contre, la recherche de transitions laser dans de nouvelles vapeurs est très fructueuse. A cet égard, des tentatives comme celles que nous avons décrites, utilisant l'excitation d'une vapeur en cathode creuse, et qui n'ont pas encore donné de résultat, méritent certainement d'être poursuivies.

L'étude spectrométrique à très haute résolution des structures de raies laser met en oeuvre des montages dont le principe est relativement simple : il s'agit essentiellement d'un étalon de Fabry-Perot utilisé comme analyseur de radiations. La grande intensité des raies laser, ainsi que les progrès réalisés

dans le domaine des récepteurs infrarouges, ont permis que des structures soient enregistrées jusqu'à des longueurs d'onde de l'ordre de 9μ . Aussi la limitation des mesures possibles tient-elle moins aux performances des instruments qu'aux propriétés des transitions laser étudiées. En particulier, dans le cas de gains trop faibles, les composantes hyperfines observées sont généralement trop peu nombreuses pour permettre d'atteindre les constantes des niveaux. Cette situation est assez caractéristique du néon-21. Par contre, pour le xénon, l'oscillation de nombreuses raies intenses du type $5d - 6p$, dont plusieurs sont connectées entre elles par des niveaux communs, caractérise une situation exceptionnellement favorable. Il n'apparaît pas qu'une situation aussi favorable se présente avec les raies laser d'autres éléments.

Le néon 21, élément léger, se prête bien au calcul classique de structure hyperfine : les paramètres électroniques sont peu nombreux et déterminés à partir de mesures d'une bonne précision. Ces paramètres permettent ensuite de donner une évaluation des constantes de structure hyperfine des niveaux de 8 configurations basses du néon, constantes qui devraient être utiles aux expérimentateurs qui s'intéressent à la mesure des structures hyperfines de ces niveaux. L'interprétation théorique ne fait pas intervenir d'effets spéciaux, elle constitue un test supplémentaire de la qualité du couplage intermédiaire déterminé par l'étude paramétrique des énergies. Les vecteurs propres correspondant à ce couplage peuvent être utilisés au calcul d'autres grandeurs; le calcul des probabilités de transition pour $2p^5 3p \rightarrow 2p^5 3s$ et $2p^5 4p \rightarrow 2p^5 4s$, en est un exemple typique [72].

L'interprétation théorique des structures observées dans le spectre des isotopes impairs du xénon, élément de masse moyenne, met en évidence l'intervention de plusieurs éffets. Les effets relativistes jouent un rôle important, ils déterminent la forme des opérateurs à utiliser. Les résultats du calcul sont très précis, particulièrement en ce qui concerne la structure magnétique des niveaux de la configuration $5p^5 6p$. Les paramètres électroniques de structure hyperfine que nous avons déterminé, ont été utilisés pour le calcul a priori des constantes

de la structure magnétique des niveaux de $5p^5 7p$, et les valeurs obtenues ont pu être confirmées ensuite par des mesures éffectuées sur des transitions spontanées visibles (7p - 6s) .

Outre les corrections relativistes, l'examen des valeurs prises par les paramètres montre qu'un rôle non négligeable doit être attribué aux effets d'interactions avec des configurations lointaines. L'analyse purement qualitative que nous avons faite de ces interactions demanderait à être précisée. En particulier, l'étude des configurations ayant montré l'importance du couplage spin-orbite dans le spectre de Xe I , les corrections de second ordre devraient envisager les effets correspondant à cette interaction et ne pas se limiter à ceux dûs à l'interaction électrostatique seule. De plus, une étude quantitative ne saurait être envisagée sans une extension des résultats théoriques au cas des configurations $n\ell^N\ n''\ell''$.

Un tel prolongement théorique constitue un travail relativement volumineux; Cl. Bauche-Arnoult nous a communiqué qu'elle étudie actuellement ce problème, dans le cadre de sa thèse, au Laboratoire Aimé Cotton.

La cohérence entre les valeurs obtenues expérimentalement et les valeurs calculées confirme la qualité des vecteurs propres obtenus pour les niveaux dans l'étude préalable des énergies. Ces vecteurs propres, qui montrent un mélange appréciable des configurations 6p et 7p d'une part, 6s et 5d d'autre part, ont pu être utilisés avec succès dans une étude du déplacement isotopique des isotopes pairs de xénon [28], où ils permettent de comprendre certaines anomalies apparentes de l'effet de volume pour plusieurs transitions.

ANNEXE I

RAPPELS DE DEFINITIONS ET PROPRIETES DES CAVITES LASER

La condition de résonance dans un interféromètre de Fabry-Perot plan d'épaisseur L (résonateur optique), pour des ondes planes se propageant suivant l'axe de l'appareil est donnée par l'équation de résonance :

$$2L\sigma_q = q \qquad q \text{ entier positif.}$$

Une théorie généralisée des résonateurs optiques [73][74] à miroirs concaves permet d'obtenir une équation de résonance du système de la forme :

$$2L\sigma_{qmn} = q + \frac{1}{\pi}(1 + m + n).\ \text{Arccos}\ \sqrt{(1 - \frac{L}{R_1})\ (1 - \frac{L}{R_2})}$$

(q, m, n entiers : $q > 0$ et $m \geqslant 0$)
$n \geqslant 0$)

Pour une cavité confocale où $R_1 = R_2 = L$, l'équation générale précédente devient :

$$4L\sigma_{qmn} = 2q + (1 + m + n)$$

Chaque ensemble de valeurs (q, m, n) caractérise un mode déterminé de vibration électromagnétique dans la cavité, ou mode normal. D'une façon générale ces modes correspondent aux solutions stationnaires de l'équation générale de propagation des ondes électromagnétiques, les conditions aux limites étant fixées par la cavité fermée. Un mode est dénoté TEM_{qmn} (Tranverse Electro-Magnétique); il lui correspond un nombre d'onde caractéristique σ_{qmn} .

Le nombre entier q joue ici un rôle particulier, il rappelle que sur un trajet aller et retour pour une onde à partir d'un des miroirs, la phase s'est accrue de $q \times 2\pi$. Ainsi les modes pour lesquels on a $m = n = 0$ sont appelés modes dominants ou encore modes longitudinaux ou axiaux (pour rappeler que la variable d'espace caractéristique dans ce cas est comptée suivant l'axe de la cavité). Deux modes dominants consécutifs étant, d'évidence, espacés en nombre d'onde d'une quantité $\delta\sigma = \sigma_{q+1} - \sigma_q = \frac{1}{2L}$.

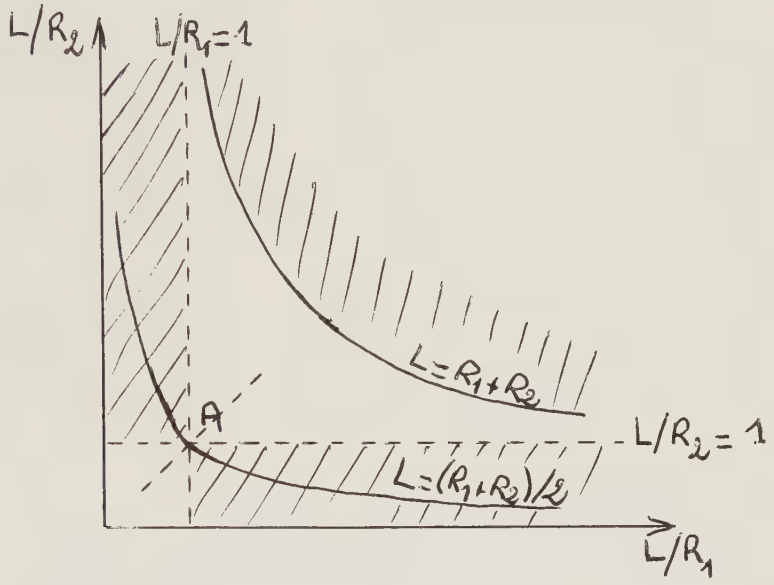
Les nombres m et n caractérisent les propriétés de symétrie du système dans des directions perpendiculaires à l'axe, et correspondent à des modes non dominants appelés encore modes latéraux ou tranversaux. Ces modes présentent une dégénérescence en m et n.

Dans un traitement théorique élaboré des modes normaux d'oscillation d'une cavité sphérique quelconque, on fait jouer usuellement un rôle particulier à un paramètre N défini par $N = d^2/\lambda L$, qu'on appelle nombre de Fresnel. Ce paramètre représente le nombre de zônes de Fresnel vues sur l'un des miroirs à partir du sommet de l'autre.

Des calculs théoriques montrent que la fraction de puissance perdue par diffraction au cours d'un trajet simple de l'onde dans une cavité sphérique confocale, décroit rapidement pour des valeurs de N de plus en plus élevées. La décroissance est pratiquement exponentielle pour les modes dominants, les pertes sont inférieures à $0,01\%$ dès $N = 1,2$ pour les modes TEM_{00q}. Ces résultats expliquent la valeur de $N = 4$ choisie pour le grand laser.

On peut encore extraire de ces études théoriques les conditions de pertes faibles suivant la configuration de la cavité sphérique [75]. Ces conditions se lisent aisément sur le diagramme suivant.

Les zones hachurées représentent les régions de fortes pertes. L'hyperbole $2L = R_1 + R_2$ correspond aux cavités confocales, le point A correspond à une cavité confocale symétrique. On peut encore remarquer que les configurations symétriques telles que $R_1 = R_2 = R$ donnent lieu à de faibles pertes dès que l'on a $L < 2R$.



ANNEXE II

ETUDE PARAMETRIQUE DES CONFIGURATIONS BASSES DE Ne I ET Xe I

A - II - INTRODUCTION

Nous donnons les résultats de l'étude paramétrique des énergies des niveaux des 5 configurations impaires et 3 configurations paires les plus basses de Ne I, ainsi que des 2 configurations impaires et des 2 configurations paires les plus basses de Xe I.

Le calcul tient compte explicitement des interactions avec la configuration la plus proche (sauf pour la configuration $2p^5 3s$ de Ne I qui paraît nettement plus isolée que les autres).

Les matrices des coefficients pour les configurations impaires $p^5(s + d)$ ont été construites par G. Racah; nous avons constitué les matrices pour les configurations paires $p^5(p' + p'' + p''')$.

Les résultats sont donnés sous forme de tableaux. Celui qui contient les valeurs des paramètres, donne aussi l'écart quadratique moyen $\overline{\Delta E}$ sur les énergies, ainsi que les écarts-types sur chaque paramètre. $\overline{\Delta E}$ est défini par :

$$\overline{\Delta E} = \left[\frac{\sum_{i=1}^{N} (E_{ei} - E_{ci})^2}{N - p} \right]^{1/2}$$

où : E_{ei} énergie expérimentale du niveau i

E_{ci} " calculée " "

N nombre de niveaux

p nombre de paramètres libres.

L'écart-type ΔP_j d'un paramètre p_j (de valeur calculée P_j) est tel que si l'on fixe ce paramètre à l'une ou l'autre des valeurs $P_j \pm \Delta P_j$, l'écart qua-

dratique moyen $\overline{\Delta E}$ est exactement égal à celui obtenu dans le calcul où p_j est libre.

Les tableaux qui présentent la composition des niveaux, donnent les carrés des coefficients du développement sur la base choisie : L - S ou j - ℓ ; l'astérisque indique que le facteur de phase correspondant est égal à - 1 . Enfin, les vecteurs de base en couplage j - ℓ sont repérés par les nombres quantiques j et K . (cf. I-B-2).

Les calculs ont été éffectués sur la calculatrice Univac 1108 de la faculté des Sciences d'Orsay, en utilisant la chaîne des programmes mis au point au laboratoire [76].

A - II - 1 - Spectre de Ne I [7]

A - II - 1 - a - Configurations impaires

α) - Configurations $2p^5 3s$

Les calculs sur cette configuration ont été éffectués par E. Koenig [72]. Nous en donnons les résultats pour mémoire.

TABLEAU 43

Paramètres	Valeurs (cm^{-1})
A	135046,35 ± 0,26
G_1	743,46 ± 0,26
ζ_{2p}	517,82 ± 0,37
$\overline{\Delta E}$	0,40

TABLEAU 44

Niveaux	$E_{exp}(cm^{-1})$	$E_{calc}(cm^{-1})$	g_{exp}	g_{calc}	$^3P_2$	$^3P_1$	$^3P_0$	$^1P_1$
3s [3/2]2	134043,790	134043,398	1,503	1,500	1			
3s [3/2]1	134461,237	134460,91	1,464	1,465		0,9294		0,0706
3s'[1/2]0	134820,591	134820,71					1	
3s'[1/2]1	135890,670	135890,70	1,034	1,035		0,0706*		0,9294

β) - Configurations $2p^5(4s + 3d)$ et $2p^5(4d + 5s)$

Les paramètres sont classés en 3 groupes :

- paramètres de la configurations $2p^5nd$
- paramètres de la configuration $2p^5n's$ (S donnant la différence des hauteurs moyennes de $2p^5nd$ et $2p^5n's$).

-paramètres d'interaction entre les 2 configurations, par exemple :

$$J = \frac{1}{5} R^2(2p\ 4s, 2p\ 3d)$$

$$K = \frac{1}{3} R^1(2p\ 4s, 3d\ 2p)$$

TABLEAU 45

Paramètres	$2p^5(4s + 3d)$	$2p(5s + 4d)$
A	161885,19 ± 0,29	167275,99 ± 0,19
F_2	16,51 ± 0,08	6,99 ± 0,06
G_1	2,90 ± 0,05	1,74 ± 0,04
G_3	0,13 ± 0,04	0,08 ± 0,02

TABLEAU 45 (suite)

ζ_{2p}	520,13 ± 0,22	520,03 ± 0,15
ζ_{3d}	Fixé à 0	Fixé à 0
S	- 2845,60 ± 1,12	-1118,09 ± 0,47
G'_1	175,45 ± 0,52	67,16 ± 0,34
ζ'_{2p}	519,36 ± 0,41	519,71 ± 0,37
J	- 43 ± 11,5	- 20,5 ± 2,5
K	- 8 (Fixé)	4,17 (Fixé)
$\overline{\Delta E}$	0,49	0,34

TABLEAU 46

Niveaux	E_{exp}	E_{calc}	g_{exp}	g_{calc}
4s [3/2]2	158603,070	158603,32		1,500
4s [3/2]1	158797,954	158797,69		1,280
4s'[1/2]0	159381,94	159381,75		
4s'[1/2]1	159536,57	159536,78		1,220
3d [1/2]0	161511,590	161511,30		
3d [1/2]1	161526,134	161526,41	1,397	1,397
3d [7/2]4	161592,308	161592,11	1,249	1,250
3d [7/2]3	161594,081	161594,35	1,034	1,036
3d [3/2]2	16160,222	161609,14	1,356	1,357

TABLEAU 46 (suite)

3d [3/2]1	161638,581	161638,65	0,860	0,854
3d [5/2]2	161701,623	161702,22	0,948	0,947
3d [5/2]3	161703,413	161702,75	1,249	1,248
3d'[5/2]2	162410,617	162410,72	0,781	0,786
3d'[5/2]3	162412,138	162411,92	1,125	1,133
3d'[3/2]2	162421,944	162422,40	1,242	1,243
3d'[3/2]1	162437,624	162437,30	0,752	0,749

TABLEAU 47

Niveaux	E_{exp}	E_{calc}	g_{exp}	g_{calc}
5s [3/2]2	165830,144	165830,29	1,492	1,500
5s [3/2]1	165914,756	165914,60	1,207	1,208
5s'[1/2]0	166608,309	166608,10		
5s'[1/2]1	166658,484	166658,69	1,295	1,292
4d [1/2]0	166969,639	166969,40		
4d [1/2]1	166977,321	166977,58	1,391	1,393
4d [7/2]4	167002,007	167002,00	1,251	1,250
4d [7/2]3	167003,104	167003,30	1,040	1,036
4d [3/2]2	167013,535	167013,30	1,322	1,325
4d [3/2]1	167028,957	167028,91	0,812	0,809
4d [5/2]2	167049,580	167049,98	0,990	0,966

TABLEAU (suite)47

4d [5/2]3	167050,639	167050,25	1,248	1,261
4d'[5/2]2	167796,939	167796,91	0,783	0,767
4d'[5/2]3	167797,865	167797,86	1,116	1,119
4d'[3/2]2	167798,914	167799,23	1,230	1,275
4d'[3/2]1	167809,722	167809,65	0,797	0,798

TABLEAUX DES VECTEURS PROPRES - 48

J = 0

	^3P	$^3P'$	(1/2 1/2)	(3/2 1/2)
4s'[1/2]0	0,9992	0,0008*	0,9992	0,0008*
3d [1/2]0	0,0008	0,9992	0,0008	0,9992

J = 1

	^3P	^1P	$^3P'$	$^1P'$	$^3D'$
4s [3/2]1	0,5606	0,4388	0,0002*	0,0003*	
4s'[1/2]1	0,4387*	0,56	0,0005	0,0009*	
3d [1/2]1	0,0007	0,0004*	0,8052	0,1817*	0,0121
3d [3/2]1		0,0006	0,0777	0,5516	0,3701*
3d'[3/2]1		0,0002	0,1163	0,2656	0,6179

	(3/2 3/2)	(1/2 1/2)	(3/2 1/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)
4s [3/2]1	0,9471	0,0524		0,0003*	0,0002*
4s'[1/2]1	0,0523*	0,9464	0,0012*	0,0001	
3d [1/2]1		0,001*	0,958	0,0392	0,0018
3d [3/2]1		0,0001*	0,0405*	0,9464	0,0124
3d'[3/2]1	0,0002		0,0004*	0,0139*	0,9855

J = 2

	^3P	$^3P'$	$^1D'$	$^3F'$	$^3D'$
4s [3/2]2	0,9996	0,0004*			
3d [3/2]2	0,0003*	0,6412	0,1434		0,2151*
3d [5/2]2			0,4206	0,299*	0,2804
3d'[5/2]2			0,1794	0,701	0,1196
3d'[3/2]2	0,0001	0,3585	0,2565*		0,3849

	(3/2 3/2)	(3/2 3/2)	(3/2 5/2)	(1/2 5/2)	(1/2 3/2)
4s [3/2]2	0,9996	0,0002*			0,0001*
3d [3/2]2	0,0003	0,9796			0,0201
3d [5/2]2			0,9924	0,0076*	
3d'[5/2]2			0,0076	0,9917	0,0007*
3d'[3/2]2	0,0001	0,0202*		0,0007	0,9791

J = 3 + 4

	$^3F_4$	$^1F_3$	$^3D_3$	$^3F_3$	(3/2 7/2)	(3/2 7/2)	(3/2 5/2)	(1/2 5/2)
3d [7/2]4	1				1			
3d [7/2]3		0,5644	0,0001*	0,4355		0,9999	0,0001*	
3d [5/2]3		0,1331	0,702	0,165*		0,0001	0,9925	0,0074
3d' [5/2]3		0,3025*	0,298	0,3995			0,0074*	0,9926

J = 0

	^3P	$^3P'$	(1/2 1/2)(3/2 1/2)	
5s'[1/2]0	0,9935	0,0065*	0,9935	0,0065*
4d [1/2]0	0,0065	0,9935	0,0065	0,9935

J = 1

	^3P	^1P	$^3P'$	$^1P'$	$^3D'$
5s [3/2]1	0,416	0,5837	0,0002*	0,0001*	
5s'[1/2]1	0,5796	0,4144*	0,0047*	0,0014	
4d [1/2]1	0,0043	0,0017*	0,8037	0,1678*	0,0224*
4d [3/2]1		0,0002	0,0487	0,5206	0,4304*
4d'[3/2]1			0,1426	0,3102	0,5471

	(3/2 3/2)	(1/2 1/2)	(3/2 1/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)
5s [3/2]1	0,9924	0,0073	0,0001*	0,0002*	0,0001*
5s'[1/2]1	0,0074*	0,9866	0,0059*	0,0001*	
4d [1/2]1		0,0061	0,938	0,0554	0,0006
4d [3/2]1	0,0002	0,0001*	0,0559*	0,9422	0,0018
4d'[3/2]1	0,0001		0,0002*	0,0021*	0,9976

J = 2

	^3P	$^3P'$	$^1D'$	$^3F'$	$^3D'$
5s [3/2]2	0,9996	0,0004*			
4d [3/2]2	0,0003	0,5616	0,1752		0,2628*
4d [5/2]2			0,4488	0,252*	0,2992
4d'[5/2]2			0,1513	0,748	0,1007
4d'[3/2]2	0,0001	0,438	0,2246*		0,3373

	(3/2 3/2)	(3/2 3/2)	(3/2 5/2)	(1/2 5/2)	(1/2 3/2)
5s [3/2]2	0,9996	0,0003*			0,0001*
4d [3/2]2	0,0003	0,9959			0,0037
4d [5/2]2			0,9988	0,0012*	
4d'[5/2]2			0,0012	0,9981	0,0007*
4d'[3/2]2	0,0001	0,0037*		0,0007	0,9955

J = 3 + 4

	$^3F_4$	$^1F_3$	$^3D_3$	$^3F_3$	(3/2 7/2)	(3/2 7/2)	(3/2 5/2)	(1/2 5/2)
4d [7/2]4	1				1			
4d [7/2]3		0,5642	0,0001*	0,4357		0,9999	0,0001*	
4d [5/2]3		0,1139	0,7484	0,1377*		0,0001	0,9987	0,0012
4d'[5/2]3		0,3218*	0,2515	0,4266			0,0012*	0,9988

A - II - 1 - b - Configurations paires $2p^5(3p + 4p + 5p)$

Les 3 configurations paires (numérotées 1, 2, 3) ont été traitées en tenant compte des interactions mutuelles. Les interactions de configurations lointaines sont partiellement incluses dans notre calcul par les paramètres α_i $(i = 1,2,3)$ dont la dépendance angulaire est en $L(L + 1)$ [50].

Ces interactions ne sont pas négligeables, et l'introduction des $\overline{\alpha_i}$ nous a montré une amélioration tout à fait spectaculaire des résultats : l'écart quadratique moyen $\overline{\Delta E}$ pour l'ensemble des niveaux des 2 configurations passe de la valeur 60 cm^{-1} à la valeur 2,87 cm^{-1}, d'autre part ζ_{2p} dans la configuration $2p^53p$ passe de la valeur 378 cm^{-1} à la valeur 518,7 cm^{-1}, qui est très voisine de celles trouvées dans les autres configurations et indique une bonne cohérence avec l'approximation du champ central. L'amélioration des valeurs de g calculées constitue un premier test de qualité des fonctions d'onde, un autre test est fourni par le calcul des structures hyperfines.

Le nombre élevé des paramètres nous a conduit à fixer quelques uns d'entre eux par des relations approchées. Les intégrales directes R_o, dont l'effet au second ordre de perturbation par rapport au champ central consiste à déplacer l'ensemble des niveaux d'une configuration par rapport à une autre, ont été fixés à la valeur nulle : cet effet est pris en compte par les paramètres A et S. Par ailleurs, en utilisant la propriété selon laquelle les fonctions radiales des électrons $n\ell$ et $(n + 1)\ell$ sont approximativement affines près du noyau sur leur $(n - \ell - 1)$ premières "bosses", il est possible de fixer des rapports entre les intégrales d'échange qui sont des intégrales de recouvrement. Nous avons ainsi posé les relations [61]:

$$\zeta_{3p}/\zeta_{2p} = p^2 \qquad \zeta_{4p}/\zeta_{2p} = p^2q^2 \qquad \zeta_{5p}/\zeta_{2p} = p^2q^2r^2$$

$$\zeta_{3p4p}/\zeta_{2p} = p^2q \qquad \zeta_{3p5p}/\zeta_{2p} = p^2qr \qquad \zeta_{4p5p}/\zeta_{2p} = p^2q^2r$$

$$G_o(2p5p)/G_o(2p4p) = G_2(2p5p)/G_2(2p4p) = r^2$$

$$R'_o(2p3p,5p2p)/G_o(2p4p) = R_2/G_2 = 1/q$$

relations à partir desquelles il est très simple de déduire toutes celles figurant dans le tableau des paramètres.

Nous avons obtenu pour les rapports les valeurs :

$$q = 0{,}125 \qquad q = 0{,}56 \qquad r = 0{,}66$$

Enfin les intégrales directes R_2 d'interaction entre les configurations n'ont pu être évaluées qu'en fixant tous les autres paramètres (l'expérience ayant montré que le processus était convergent après une suite de plusieurs calculs); il s'agit d'une difficulté dont l'origine tient aux faibles éffets des configurations voisines.

TABLEAU 49

Paramètres	$2p^5 3p(1)$	$2p^5 4p(2)$	$2p^5 5p(3)$
A ou 5	149920,32 ± 2,82	13162,35 ± 3,51	1786,75 ± 3,44
F_2	155,24 ± 0,35	44,93 ± 0,27	20,09 ± 0,33
G_o	805,00 ± 0,83	218,93 ± 0,58	93,77 [$=r^2G_o(2)$]
G_2	37,41 ± 0,53	11,79 ± 0,5	5,21 [$=r^2G_2(2)$]
ζ_{2p}	518,68 ± 3,56	519,22 ± 1,47	517,61 ± 1,31
ζ_{np}	8,03 ± 2,13	2,67 [$=q^2\zeta_{2p}$]	3,23 ± 1,58
$\overline{\alpha}$	25,0 ± 0,74	8,91 ± 0,58	9,14 ± 0,51
$R_o(12)$			
$R_o(13)$	Fixés à 0		
$R_o(23)$			
$R_2(12)$	67,83		
$R_2(13)$	69,94	Fixés	
$R_2(23)$	35,53		
$R_o(12)$	390,93	$[= \frac{1}{q} G_o(2)]$	
$R'_o(13)$	256,20	$[= \frac{r}{q} G_o(2)]$	
$R'_o(23)$	143,28	$[= r\, G_o(2)]$	
$R'_2(12)$	21,01	$[= \frac{1}{q} G_2(2)]$	
$R'_2(13)$	13,82	$[= \frac{r}{q} G_2(2)]$	
$R'_2(23)$	7,84	$[= r\, G_2(2)]$	
ζ_{3p4p}	4,75	$[= p^2 q\, \zeta_{2p}]$	
ζ_{3p5p}	3,12	$[= p^2 qr\, \zeta_{2p}]$	
ζ_{4p5p}	1,43	$[= p^2 q^2 r\, \zeta_{2p}]$	

$\overline{\Delta E} = 2,87$

TABLEAU 50

Niveaux	$E_{exp.}$	$E_{calc.}$	$g_{exp.}$	$g_{calc.}$
$3p\ [1/2]_1$	148259,746	148259,74	1,984	1,988
$3p\ [5/2]_3$	149659,000	149659,19	1,329	1,333
$3p\ [5/2]_2$	149826,181	149827,44	1,137	1,136
$3p\ [3/2]_1$	150123,551	150122,46	0,669	0,680
$3p\ [3/2]_2$	150317,821	150316,66	1,229	1,230
$3p\ [1/2]_0$	150919,391	150920,96		
$3p'[3/2]_1$	150774,072	150772,44	0,999	0,985
$3p'[3/2]_2$	150860,468	150861,43	1,301	1,301
$3p'[1/2]_1$	151040,413	151040,29	1,340	1,346
$3p'[1/2]_0$	152972,697	152972,64		
$4p\ [1/2]_1$	162519,850	162519,83	1,929	1,931
$4p\ [5/2]_3$	162832,683	162832,98	1,328	1,333
$4p\ [5/2]_2$	162901,093	162901,09	1,112	1,116
$4p\ [3/2]_1$	163014,600	163015,10	0,974	0,980
$4p\ [3/2]_2$	163040,330	163041,60	1,360	1,366
$4p\ [1/2]_0$	163403,281	163400,36		
$4p'[3/2]_1$	163659,248	163659,10	0,685	0,682
$4p'[3/2]_2$	163710,581	163709,64	1,184	1,186
$4p'[1/2]_1$	163709,699	163711,03	1,397	1,407
$4p'[1/2]_0$	164287,864	164288,48		

TABLEAU 50 (suite)

Niveaux	$E_{exp.}$	$E_{calc.}$	$g_{exp.}$	$g_{calc.}$
5p [1/2]1	167451,44	167450,91		1,869
5p [5/2]3	167561,03	167564,16		1,333
5p [5/2]2	167593,18	167593,04		1,114
5p [3/2]1	167641,53	167641,59		1,027
5p [3/2]2	167650,60	167652,72		1,381
5p [1/2]0	167869,17	167864,08		
5p'[3/2]1	168357,44	168353,87		0,634
5p'[3/2]2	168380,69	168379,77		1,173
5p'[1/2]1	168360,57	168361,34		1,470
5p'[1/2]0	168588,83	168593,30		

TABLEAUX DES VECTEURS PROPRES - 51

J = 0

	^3P	^1S	$^3P'$	$^1S'$	$^3P''$	$^1S''$
3p [1/2]0	0,9673	0,031*	0,0007*	0,0005	0,0004*	0,0001
3p'[1/2]0	0,0316	0,9449		0,0211*		0,0024*
4p [1/2]0	0,0004	0,0045*	0,7903	0,1992	0,0016*	0,0039
4p'[1/2]0	0,0002	0,0146	0,2074	0,7584	0,0001*	0,0193*
5p [1/2]0	0,0002	0,0023*	0,0006	0,0103*	0,5703	0,4163*
5p'[1/2]0	0,0002	0,0027	0,001	0,0104	0,4277	0,5580

	(3/2 1/2)	(1/2 1/2)	(3/2 1/2)	(1/2 1/2)	(3/2 1/2)	(1/2 1/2)
3p [1/2]0	0,5111	0,4872*	0,0012*	0,0001	0,0003*	0,0001
3p'[1/2]0	0,4728	0,5037	0,0140*	0,0072*	0,0014*	0,0009*
4p [1/2]0	0,0045	0,0005	0,7742	0,2153*	0,0055*	
4p'[1/2]0	0,0081	0,0067	0,1971	0,7687	0,0117*	0,0077*
5p [1/2]0	0,0023	0,0002	0,0093	0,0016	0,9292	0,0574*
5p'[1/2]0	0,0011	0,0018	0,0042	0,0072	0,0519	0,9338

J = 1

	^3S	^1P	^3P	^3D	$^3S'$	$^1P'$	$^3P'$	$^3D'$	$^3S''$	$^1P''$	$^3P''$	$^3D''$
3p [1/2]1	0,9786	0,0056	0,0121		0,0023				0,0013			
3p [3/2]1		0,1772*	0,0916	0,7309		0,0001	0,0001*			0,0001		
3p'[3/2]1		0,4906	0,2395*	0,2690		0,0004*	0,0002			0,0002	0,0001	
3p'[1/2]1	0,0176*	0,3255	0,6556		0,0001*	0,0002*	0,0005*			0,0001*	0,0003*	
4p [1/2]1	0,0023*		0,0001		0,8895	0,0338	0,0707		0,0035			
4p [3/2]1		0,0003	0,0002*			0,4789	0,2393*	0,2803*		0,0007*	0,0004	
4p'[3/2]1		0,0001	0,0001*			0,1967	0,0832*	0,7193		0,0004*	0,0002	0,0001
4p'[1/2]1	0,0002	0,0002	0,0004		0,1035*	0,2882	0,6044	0,0004*	0,0009*	0,0006*	0,0012*	
5p [1/2]1	0,0009*		0,0001		0,004*	0,0002	0,0005		0,7948	0,0618	0,1375	
5p [3/2]1		0,0002	0,0001*			0,0009	0,0004*		0,0001	0,532	0,2599*	0,2061*
5p'[3/2]1		0,0001				0,0003			0,0082*	0,219	0,0116*	0,7607
5p'[1/2]1	0,0002	0,0001	0,0002		0,0005	0,0003	0,0008		0,1911*	0,1851	0,5887	0,033*

	(3/2 1/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)	(1/2 1/2)	(3/2 1/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)	(1/2 1/2)	(3/2 1/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)	(1/2 1/2)
3p [1/2]1	0,7787			0,2177	0,0014			0,0008	0,0008			0,0005
3p [3/2]1		0,6748	0,3249			0,0001*	0,0001			0,0001*		
3p'[3/2]1		0,3243*	0,6748	0,0001		0,0005				0,0003		
3p'[1/2]1	0,2187*			0,7801	0,0005			0,0003*	0,0003			0,0002*
4p [1/2]1	0,0011*			0,0014*	0,9127			0,0813	0,0019			0,0016
4p [3/2]1		0,0004	0,0001*			0,9791	0,0193			0,0009*	0,0002	
4p'[3/2]1		0,0002*				0,019*	0,9801			0,0007		
4p'[1/2]1	0,0007*			0,0001	0,0825*		0,0001	0,9139	0,0024			0,0003*
5p [1/2]1	0,0003*			0,0007*	0,0013*			0,0035*	0,97	0,0002		0,024
5p [3/2]1		0,0003	0,0001*			0,001	0,0004*		0,0001*	0,9953	0,0028	
5p'[3/2]1		0,0001*			0,0001	0,0003*			0,001	0,0026*	0,9608	0,0351*
5p'[1/2]1	0,0005*				0,0014*			0,0002	0,0233*	0,0001*	0,0361	0,9384

J = 2

	^3P	^1D	^3D	$^3P'$	$^1D'$	$^3D'$	$^3P''$	$^1D''$	$^3D''$
3p [5/2]2	0,0208	0,2263*	0,7529						
3p [3/2]2	0,4351	0,4893	0,075	0,0003*	0,0001*		0,0002*		
3p'[3/2]2	0,543	0,2842*	0,1721*	0,0004*	0,0001		0,0002*		
4p [5/2]2		0,0001*		0,0384	0,3846*	0,5767			
4p [3/2]2	0,0005			0,7184	0,2454	0,0344	0,0011*	0,0001*	
4p'[3/2]2	0,0002*	0,0001		0,2408*	0,3695	0,3888	0,0005	0,0001*	
5p [5/2]2				0,0001	0,0001*	0,0001*	0,0516	0,4231	0,525
5p [3/2]2	0,0003			0,0013	0		0,7524	0,223	0,0229
5p'[3/2]2	0,0001*			0,0003*	0,0001*		0,1939*	0,3537*	0,4520

	(3/2 5/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)	(3/2 5/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)	(3/2 5/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)
3p [5/2]2	0,8413	0,08*	0,0787*			0,0001*			
3p [3/2]2	0,1359	0,7549	0,1086	0,0001*	0,0003			0,0002*	
3p'[3/2]2	0,0227	0,1642*	0,8124	0,0001*	0,0003	0,0001*		0,0002	
4p [5/2]2			0,0001	0,9229	0,067*	0,0099*			0,0001*
4p [3/2]2		0,0005		0,071	0,922	0,0053		0,0011*	0,0001
4p'[3/2]2	0,0001	0,0001*	0,0001	0,0059	0,0091*	0,9842	0,0001*	0,0004	0,0001*
5p [5/2]2						0,0002	0,9256	0,0721*	0,002*
5p [3/2]2		0,0003			0,0011	0,0002*	0,073	0,9246	0,0007
5p'[3/2]2		0,0001*		0,0001	0,0002*	0,0001	0,0013	0,0014*	0,9969

J = 3

	^3D	$^3D'$	$^3D''$	(3/2 5/2)	(3/2 5/2)	(3/2 5/2)
3p [5/2]3	1			1		
4p [5/2]3		0,9999	0,0001		0,9999	0,0001
5p [5/2]3		0,0001*	0,9999		0,0001*	0,9999

A - II - 2 - Spectre de Xe I [7]

A - II - 2 - a - Configurations impaires $5p^5(6s + 5d)$

Nous avons introduit un paramètre $\overline{\alpha}$, l'expérience nous ayant montré une nette amélioration particulièrement dans l'évaluation de l'énergie du niveau $5d[7/2]4$ (Seul niveau de ces configurations de $J = 4$).

TABLEAU 52

Paramètres	Valeurs (cm^{-1})
A	83990,4 ± 90
F_2	285,2 ± 11,7
G_1	324,0 ± 8,1
G_3	20,4 ± 1,9
ζ_{5p}	692,4 ± 33
ζ_{5d}	Fixé à 0
S	- 12637,6 ± 134,5
G'_1	710,8 ± 77,8
ζ'_{5p}	6780,7 ± 996,4
$\overline{\alpha}$	15,9 ± 10,3
J	- 1200,8 ± 51,7
K	666,2 ± 370,3
$\overline{\Delta E}$	73

Le paramètre d'interaction K est déterminé avec une précision très médiocre (celà n'est pas surprenant si l'on considère que la configuration $5p^5 6s$

n'apporte que 4 niveaux expérimentaux mais intéresse 5 paramètres indépendants : S , ζ'_{5p} G'_1 J et K). De plus on obtient $\zeta_{5p}(5p^5 6s) < \zeta_{5p}(5p^5 5d)$, ce qui s'explique par l'effet d'écran normalement plus important pour l'électron 6s , plus proche du noyau que l'électron 5d .

TABLEAU 53

Niveaux	$E_{exp.}$	$E_{calc.}$	$g_{exp.}$	$g_{calc.}$
6s [3/2]1	68045,663	68049,22	1,204	1,208
6s 3/2 2	67068,047	67064,25	1,500	1,500
6s' 1/2 0	76197,292	76201,07		
6s' 1/2 1	77185,560	77182,9	1,321	1,312
5d 1/2 0	79771,798	79782,99		
5d 1/2 1	79987,16	79970,94	1,395	1,396
5d 7/2 4	80197,16	80145,73	1,254	1,250
5d 7/2 3	80970,93	80950,34	1,070	1,078
5d 3/2 2	80323,28	80356,37	1,376	1,371
5d 3/2 1	83890,47	83960,39		0,763
5d 5/2 2	81926,04	81952,41	0,929	0,938
5d 5/2 3	82430,72	82380,81		1,216
5d' 3/2 2	91447,99	91403,68	1,274	1,230
5d' 3/2 1	93618,75	93545,58		0,821
5d' 5/2 2	91153,16	91205,17		0,795
5d' 5/2 3	91747,07	91809,26	1,126	1,123

TABLEAUX DES VECTEURS PROPRES - 54

J = 0

	^3P	$^3P'$	(1/2 1/2)(3/2 1/2)	
6s'[1/2]0	0,6588	0,3412*	0,6588	0,3412*
5d [1/2]0	0,3412	0,6588	0,3412	0,6588

J = 1

	^1P	^3P	$^3P'$	$^1P'$	$^3D'$
6s [3/2]1	0,5829	0,4078	0,0089*	0,0002	
6s'[1/2]1	0,3444*	0,39	0,2485*	0,0029	0,0142
5d [1/2]1	0,0726*	0,2011	0,6522	0,0132*	0,061*
5d [3/2]1		0,0003*	0,0111*	0,5016	0,487*
5d'[3/2]1	0,0001*	0,0008	0,0793	0,4821	0,4377

	(3/2 3/2)	(1/2 1/2)	(3/2 1/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)
6s [3/2]1	0,9842	0,0065	0,0074*	0,0014*	0,0005*
6s'[1/2]1	0,0141*	0,7204	0,192*	0,0659*	0,0077*
5d [1/2]1	0,0015	0,2722	0,5265	0,192	0,0078
5d [3/2]1	0,0002*	0,0001*	0,2449*	0,7384	0,0165*
5d'[3/2]1		0,0009	0,0292*	0,0024	0,9675

J = 2

	^3P	$^3P'$	$^1D'$	$^3D'$	$^3F'$
6s [3/2]2	0,9872	0,012*	0,0003*	0,0005	
5d 3/2 2	0,0112	0,6656	0,1293	0,1939*	
5d 5/2 2			0,4071	0,2714	0,3215*
5d' 3/2 2			0,1929	0,1286	0,6785
5d' 5/2 2	0,0016	0,3224	0,2704*	0,4056	

	(3/2 3/2)	(3/2 3/2)	(3/2 5/2)	(1/2 3/2)	(1/2 5/2)
6s 3/2 2	0,9872	0,0094*			0,0034*
5d 3/2 2	0,0112	0,9586			0,0302
5d 5/2 2			0,9876	0,0124*	
5d' 3/2 2			0,0124	0,9869	0,0007*
5d' 5/2 2	0,0016	0,032*		0,0007	0,9657

J = 3 + 4

	$^3F_4$	$^3F_3$	$^1F_3$	$^3D_3$	(3/2 7/2)	(3/2 7/2)	(3/2 5/2)	(1/2 5/2)
5d [7/2]4	1				1			
5d [7/2]3		0,6361	0,2898	0,0741*		0,8632	0,1283*	0,0085*
5d [5/2]3		0,0144*	0,341	0,6446		0,1316	0,8669	0,0015
5d'[5/2]3		0,3494*	0,3692	0,2813*		0,0052	0,0048*	0,99

A - II - 2 - b - Configurations paires $5p^5(6p + 7p)$

La valeur du paramètre de couplage spin-orbite ζ_{5p} est directement liée à l'intervalle d'énergie qui sépare les niveaux du doublet de l'ion $5p^5$. Nous avons choisi d'égaler $\zeta_{5p}(5p^5 6p)$ à $\zeta_{5p}(5p^5 7p)$ (hypothèse qui serait vérifiée si l'approximation du champ central était rigoureuse), car les 4 niveaux les plus élevés de la configuration $5p^5 7p$ construits sur le terme $5p^5\ ^2P_{1/2}$ ne sont pas connus, étant situés très probablement au dessus du potentiel d'ionisation [7].

Comme pour l'étude des configurations paires de Ne I , nous avons imposé des rapports entre certains paramètres (cf. A-II-1-b).

TABLEAU 55

Paramètres	$5p^5 6p(1)$	$5p^5 7p(2)$
A ou S	81849,0 ± 10,7	10073,1 ± 15,8
F_2	168,4 ± 2,8	49,3 ± 3,2
G_o	633,9 ± 6,4	158,5 $[=q^2 G_o(1)]$
G_2	34,3 ± 4,1	8,6 $[=q^2 G_2(1)]$
ζ_{5p}	6928,6 ± 11,9	6928,6 $[=\zeta_{5p}(1)]$
ζ_{np}	353,7 $[=p^2\zeta_{5p}]$	88,4 $[=p^2q^2\zeta_{5p}]$
R_o	Fixé à 0	
R_2	80,5 ± 2,3	
R'_o	316,9 $[=qG_o(1)]$	
R'_2	17,1 $[=qG_2(1)]$	
ζ_{6p7p}	176,8 $[=p^2q\zeta_{5p}]$	
$\overline{\Delta E}$	24,6	

On obtient pour les rapports p et q les valeurs :

$$p = 0,226$$

$$q = 0,5$$

TABLEAU 56

Niveaux	$E_{exp.}$	$E_{calc.}$	$g_{exp.}$	lc.
6p [1/2]1	77269,649	77278,19	1,852	1,853
6p [5/2]2	78120,303	78122,05	1,106	1,115
6p [5/2]3	78403,562	78392,82	1,336	1,333
6p [3/2]1	78956,538	78958,35	1,022	1,024
6p [3/2]2	79212,970	79216,60	1,379	1,378
6p [1/2]0	80119,474	80113,94		
6p'[3/2]1	88379,647	88341,22	0,790	0,797
6p'[3/2]2	89162,880	89158,23	1,195	1,202
6p'[1/2]1	89279,233	89294,40	1,552	1,558
7p [1/2]1	87927,652	87944,35	1,728	1,699
7p [5/2]2	88352,201	88369,78	1,123	1,124
7p [5/2]3	88469,732	88453,27	1,348	1,333
7p [3/2]1	88745,081	88773,19	0,903	0,916
7p [3/2]2	88687,020	88681,17	1,347	1,345
7p [1/2]0	88842,781	88823,31		

TABLEAUX DES VECTEURS PROPRES- 57

J = 0

	^1S	^3P	$^1S'$	$^3P'$
6p [1/2]0	0,6036	0,385*	0,009*	0,0024
6p' 1/2 0	0,3652	0,4776	0,0843	0,0729*
7p 1/2 0	0,0292	0,1365*	0,562	0,2723*
(7p' 1/2 0)	0,002	0,0009	0,3447	0,6524

	(3/2 1/2)	(1/2 1/2)	(1/2 1/2)	(1/2 1/2)
6p 1/2 0	0,9858	0,0028*	0,0111*	0,0002*
6p' 1/2 0	0,0081	0,8347	0,1546	0,0026*
6p 1/2 0	0,0057	0,1599*	0,8342	0,0001
(7p' 1/2 0)	0,0004	0,0025	0,0001	0,997

J = 1

	^3S	^1P	^3P	^3D	$^3S'$	$^1P'$	$^3P'$	$^3D'$
6p [1/2]1	0,7793	0,026	0,2271	0,0047	0,0029		0,0001	
6p [3/2]1	0,0196	0,5859	0,2016*	0,192*		0,0008*	0,0001	
6p'[3/2]1	0,0033*	0,1076	0,0185*	0,5304	0,0144	0,1329*	0,1321	0,0608
6p'[1/2]1	0,2042*	0,1471	0,4434	0,0263*	0,1297	0,0187	0,0306	
7p [1/2]1	0,0332	0,0775*	0,0935*	0,0151*	0,5382	0,066	0,1765	0,0001
7p [3/2]2	0,0002*	0,0558	0,0154*	0,2313	0,0118	0,4327	0,1385*	0,1143*
(7p'[3/2]1)	0,0001			0,0003*	0,025*	0,2165	0,0013	0,7569
(7p'[1/2]1)	0,0002	0,0001	0,0005		0,2781*	0,1324	0,5207	0,068*

	(3/2 1/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)	(1/2 1/2)	(3/2 1/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)	(1/2 1/2)
6p [1/2]1	0,9603	0,0252		0,0115	0,0022	0,0001		0,0007
6p [3/2]1	0,0249*	0,9722	0,0017	0,0004*		0,0008*	0,0001	
6p'[3/2]1		0,0004*	0,652	0,0074*	0,0219	0,318	0,0003	
6p'[1/2]1	0,0059*		0,0273	0,7878	0,1781*	0,0001		0,0008*
7p [1/2]1	0,0081*		0,0193*	0,1919	0,7788	0,0011		0,0007
7p [3/2]1	0,0001*	0,0021	0,2996*	0,0008	0,0176*	0,6797		
(7p'[3/2]1)	0,0001	0,0001*	0,0002		0,0001	0,0001*	0,9249	0,0745
(7p'[1/2]1)	0,0007*			0,0002	0,0013*		0,0746	0,9233

J = 2

	^3P	^1D	^3D	$^3P'$	$^1D'$	$^3D'$
6p [5/2]2	0,061	0,4307*	0,5081			0,0002
6p [3/2]2	0,7475	0,2304	0,0202	0,0016*	0,0003*	
6p'[3/2]2	0,1788*	0,2962	0,4236	0,075*	0,001*	0,0254*
7p [5/2]2	0,0062*	0,0122	0,0125	0,0783	0,4125*	0,4783
7p [3/2]2	0,0063*	0,0303	0,0356	0,6712	0,252	0,0045
(7p'[3/2]2)	0,0002*	0,0001		0,1739*	0,3341	0,4916

	(3/2 5/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)	(3/2 5/2)	(3/2 3/2)	(1/2 3/2)
6p [5/2]2	0,92	0,0792*	0,0006*	0,0001		
6p [3/2]2	0,0795	0,9179	0,0007	0,0002*	0,0017*	
6p'[3/2]2	0,0001	0,0017*	0,8968	0,0058	0,0953*	0,0004*
7p [5/2]2	0,0002*	0,0001	0,0306*	0,874	0,0951*	
7p [3/2]2	0,0002	0,001	0,071	0,1199	0,8078	
(7p'[3/2]2)		0,0001*	0,0003		0,0001*	0,9995

J = 3

	^3D	$^3D'$	(3/2 5/2)(3/2 5/2)
6p [5/2]3	1		1
7p [5/2]3		1	1

ANNEXE III

CALCUL DES CONSTANTES DE STRUCTURE HYPERFINE MAGNETIQUE ET QUADRUPOLAIRE DES NIVEAUX DE $p^5 n\ell$ EN COUPLAGE $j - \ell$ PUR .

Outre l'hypothèse du couplage $j - \ell$ pur, nous supposons négligeables les termes dus à l'électron extérieur $n\ell$.

A - III - 1 - Structure magnétique (cf. III - A, 1)

$$\Delta W^{\mu}_{\alpha JF} = < (\alpha J, I)FM_F \, | X^{(1)} . I^{(1)} | \, (\alpha J, I)FM_F >$$

On a ici : $\alpha \equiv [(p^5 j, n\ell)K, 1/2]J$

$$\Delta W^{\mu}_{\alpha JF} = (-1)^{J+I+F} \begin{Bmatrix} J & I & F \\ I & J & 1 \end{Bmatrix} < \alpha J \, \| \, X^{(1)} \| \, \alpha J > < I \, \| \, I^{(1)} \| \, I >$$

$$= (-1)^{J+I+F} \begin{Bmatrix} J & I & F \\ I & J & 1 \end{Bmatrix} [\, I(I+1)(2I+1)\,]^{1/2} < \alpha J \, \| \, X^{(1)} \| \, \alpha J >$$

De plus, en explicitant α , $X^{(1)}$ n'agissant que sur $p^5 j$:

$$< [(p^5 j, n\ell)K, 1/2]J \| \, X^{(1)} \| \, \alpha J > = (-1)^{K+\frac{1}{2}+J+1} (2J+1) \begin{Bmatrix} J & 1 & J \\ K & 1/2 & K \end{Bmatrix} . < (p^5 j, n\ell)K \, \| \, X^{(1)} \| (p^5 j, n\ell)K >$$

$$= (-1)^{K+\frac{1}{2}+J+1} (2J+1) \begin{Bmatrix} J & 1 & J \\ K & 1/2 & K \end{Bmatrix} (-1)^{j+\ell+K+1} \begin{Bmatrix} K & 1 & K \\ j & \ell & j \end{Bmatrix} (2K+1) < p^5 j \| X^{(1)} \| p^5 j >$$

On a enfin $\langle p^5 j \| X^{(1)} \| p^5 j \rangle = \langle pj \| X^{(1)} \| pj \rangle = [\, j(j+1)(2j+1)]^{1/2} a_j$

si a_j est la constante de structure hyperfine magnétique de l'électron pj .

Après développement des symboles 6j et en tenant compte de la formule de Casimir $\Delta W^{\mu}_{\alpha JF} = \frac{1}{2} A_{\alpha J} [\, F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)]$ on obtient :

- Cas $J = K + \frac{1}{2}$

$$A_{\alpha J} = \frac{[j(J+1) + K(K+1) - \ell(\ell+1)]}{(2K+1)(K+1)} a_j$$

- Cas $J = K - \frac{1}{2}$

$$A_{\alpha J} = \frac{[j(j+1) + K(K+1) - \ell(\ell+1)]}{K(2K+1)} a_j$$

A - III - 2 - Structure quadrupolaire (cf. III-A-1-)

$$W^{Q}_{\alpha JF} = \langle (\alpha J, I) F M_F | Y^{(2)} . K^{(2)} | (\alpha J, I) F M_F \rangle$$

$$= (-1)^{J+I+F} \begin{Bmatrix} J & I & F \\ I & J & 2 \end{Bmatrix} \langle I \| K^{(2)} \| I \rangle . \langle \alpha J \| Y^{(2)} \| \alpha J \rangle$$

$$= (-1)^{J+I+F} \begin{Bmatrix} J & I & F \\ I & J & 2 \end{Bmatrix} \frac{1}{2} [I(I+1)(2I+1)(2I-1)(2I+3)]^{1/2} . \langle \alpha J \| Y^{(2)} \| \alpha J \rangle$$

De même, $Y^{(2)}$ n'agissant que sur $p^5 j$:

$$\langle \alpha J \| Y^{(2)} \| \alpha J \rangle = \langle [(p^5 j, n\ell) K, 1/2] J \| Y^{(2)} \| [\, (p^5 j, n\ell) K, 1/2] J \rangle$$

$$= (-1)^{K+1/2+J+2} (2J+1) \begin{Bmatrix} J & 2 & J \\ K & 1/2 & K \end{Bmatrix} \langle (p^5 j, n\ell) K \| Y^{(2)} \| (p^5 j, n\ell) K \rangle$$

$$= (-1)^{K+1/2+J+2} (2J+1) \begin{Bmatrix} J & 2 & J \\ K & 1/2 & K \end{Bmatrix} (-1)^{j+\ell+K+2} (2K+1) \begin{Bmatrix} K & 2 & K \\ j & \ell & j \end{Bmatrix}$$

$$\langle p^5 j \| Y^{(2)} \| p^5 j \rangle$$

On a encore : $< p^5 j \,\|\, Y^{(2)} \|\, p^5 j > = - < pj \,\|\, Y^{(2)} \|\, pj >$

$$= - \frac{3/2\ c(c+1) - 2I(I+1)\ j(j+1)}{I(2I-1)\ j(2j-1)} \cdot \frac{b_j}{4} \cdot \frac{1}{(-1)^{j+I+F} \begin{Bmatrix} j & I & F \\ I & j & 2 \end{Bmatrix}} \cdot \frac{1}{< I \| K^{(2)} \| I >}$$

avec $c = F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)$

et $$\Delta W^{Q}_{\alpha JF} = \frac{B_{\alpha J}}{4} \frac{C(C+1) - 2I(I+1)\ J(J+1)}{I(2I-1)\ J(2J61)}$$

avec $C = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)$

On obtient finalement :

- Cas $J = K + 1/2$

$$B_{\alpha J} = \frac{-3x(x-1) + 4j(j+1)\ K(K+1)}{j(2j-1)\ (2K+2)\ (2K+3)} \cdot b_j$$

avec $x = j(j+1) + K(K+1) - \ell(\ell+1)$

- Cas $J = K - 1/2$

$$B_{\alpha J} = \frac{[-3x(x-1) + 4j(j+1)\ K(K+1)](K-1)}{2j(2j-1)\ K(2K+1)\ (K+1)} \cdot b_j$$

Ces calculs montrent en particulier que pour $j = \frac{1}{2}$, $B_{\alpha J}$ doit être nul. (cf. II - B - 3 - c -).

Parvenu au terme de cet exposé, je ne saurais manquer d'exprimer ma gratitude à M. le Professeur P. JACQUINOT, ainsi qu'à M. le Professeur R. CHABBAL, pour l'accueil qu'ils m'ont réservé au Laboratoire Aimé Cotton.

Ce sont les idées de M. le Professeur J. BROCHARD qui ont inspiré ce travail. Ses conseils éclairés ainsi que ses bienveillants encouragements ne m'ont point été comptés. Je le prie de croire à ma profonde reconnaissance et à mon respectueux attachement.

Touché de l'obligeance avec laquelle M. le Professeur A. KASTLER a accepté de faire partie de ce jury, je lui exprime mes vifs remerciements. Je sais gré à M. le Professeur B.R. JUDD de s'être intéressé aux interprétations théoriques que j'ai entreprises au cours de ce travail, et d'avoir bien voulu, de surcroît, être membre de ce jury.

Je dois à J. BAUCHE mon initiation aux méthodes théoriques, et à Y. BORDARIER l'apprentissage des techniques de calcul. Sans leur concours une part essentielle de ce travail n'aurait pu être menée à bien. Que l'un et l'autre trouvent ici le témoignage amical de ma reconnaissance. Je remercie aussi S. FENEUILLE qui, outre l'intérêt qu'il a toujours manifesté pour mon travail, s'est aimablement proposé à relire mon manuscrit. J'attache beaucoup de prix à l'assistance désintéréssée de J.F. LESPRIT lors de mesures souvent délicates; son aide m'a été précieuse, je l'en remercie bien vivement. La construction du grand laser doit énormément à l'habilité et au dévouement de M. OPPENHEIMER; je lui adresse de sincères remerciements.

L'atmosphère de cordialité qui règne au sein de l'équipe de spectroscopie laser, les discussions qui s'y tiennent, m'ont été une aide efficace, de même que, plus généralement, la sympathie et la confiance que m'ont accordées tous les membres du laboratoire. Puissent-ils s'en trouver justifiés et accepter que je leur exprime ici des sentiments de gratitude.

Mes remerciements vont aussi à l'équipe du Centre de Spectrométrie de Masse du CNRS, dirigée par M. R. BERNAS, avec qui une fructueuse collaboration s'est établie. Les mesures de structure hyperfine des isotopes impairs du xénon, ont été ainsi grandement facilitées grâce aux échantillons isotopiques de très haute pureté qu'ils ont obligeamment préparés.

BIBLIOGRAPHIE

[1] - P. GRIVET, N. BLOEMNBERGEN - Electronique Quantique, Comptes rendus de la 3e Conférence internationale - Dunod éditeur, Paris (1964).

[2] - J. VERGES - Thèse, Orsay (1969).

[3] - J. PINARD - Thèse, Orsay (1968).

[4] - W.E. LAMB - Phys. Rev. 134, 6 A p.1429 (1964).

[5] - B.R. JUDD - Operator Techniques in Atomic Spectroscopy, Mc Graw-Hill, New-York (1963).

[6] - J.F. LESPRIT - Thèse 3e cycle, Orsay (1969).

[7] - C.E. MOORE - Atomic Energy Levels, NBS, Washington D.C (1952).

[8] - J. BAUCHE - Laboratoire Aimé Cotton, Orsay. Communication personnelle.

[9] - K.A. BRIDGETT, T.A. KING - Proc. Phys. Soc. 92, p.75 (1967).
- J. Phys. (Atom. Molec. Phys.) B-2, 2, p.902 (1969).

[10] - A.L. OSHEROVICH, YA.F. VEROLAINEN - Optics and Spectrosc. 21, p.81 (1966).

[11] - R.M. PIXTON, G.R. FOWLES - Phys. Let. 29A, 11, p. 654 (1969).

[12] - R.L. ABRAMS, G.J. WOLGA - IEEE J. Qu. El. QE.3, 8, p.368 (1967).

[13] - W.R. BENNETT - Appl. Opt. (Suppl. n°2), p.3 (1965).

[14] - R. CAGNARD, R. der AGOBIAN, R. ECHARD, J.L. OTTO - Comptes Rendus 257 , p.1044 (1963).

[15] - C.K.N. PATEL, W.R. BENNETT, W.L. FAUST, R.A. Mc FARLANE - Phys. Rev. Lett. 9, p.102 (1962).

[16] - L.E.S. MATHIAS, A. CROCKER, M.S. WILLS - IEEE J. Qu. El. QE-3, p.170 (1967).

[17] - J. BROCHARD, S. LIBERMAN - Comptes Rendus 260, p.6827 (1965).

[18] - W.L. FAUST, R.A. Mc FARLANE, C.K.N. PATEL, C.G.B. GARRETT - Phys. Rev. 133, 6 A, p.1476 (1964).

[19] - S. LIBERMAN - Comptes Rendus 261, p.2601 (1965).

[20] - J. BROCHARD,Ph. CAHUZAC, R. VETTER - Comptes Rendus 265, p.467 (1967).

[21] - R.A. Mc FARLANE - Physics of Quant. Electronics, Mc Graw-Hill, p.655(1966).

[22] - Ph. CAHUZAC - Thèse 3e cycle, Orsay (1969).

[23] - R. CHABBAL - Thèse, Rev. Opt. 37, p.49 (1958).

[24] - J. SEGUIN - Thèse de doctorat d'université, Orsay (1969).

[25] - H.T. DUONG, S. GERSTENKORN, J.M. HELBERT - Rev. de Phys. Appl. T2, p.269 (1967).

[26] - H. KOPFERMANN - Nuclear Moments, Academic Press (1958).

[27] - J. CAMPLAN, R. MEUNIER, J.L. SARROUY - Nucl. Instr. and Meth. 84, p.37 (1970).

[28] - R. VETTER - Thèse, Orsay (1970).

[29] - A. BOHR, J. KOCH, E. RASMUSSEN - Arkiv för Fys. B4, 29, p.455 (1952).

[30] - D.A. JACKSON, M. COULOMBE - Colloque EGAS Paris-Orsay (1969).

[31] - H.R. SCHLOSSBERG, A. JAVAN - Phys. Rev. Lett. 17, p.25 (1966).

[32] - W.L. FAUST, M.N. Mc DERMOTT - Phys. Rev. 123, p.1 (1961).

[33] - E. BRUN, J. OESER, H.H. STAUB, C.G. TELSCHOW - Phys. Rev. 93, p.904 (1954).

[34] - P. BRIX - Zeit. für Phys. Bd132, p.579 (1952).

[35] - E. RASMUSSEN, V. MIDDELBOE - Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 32, p.1 (1960).

[36] - G.M. GROSOF, P. BUCK, W. LICHTEN, I.I. RABI - Phys. Rev. Lett. 1, p.214 (1958).

[37] - P.W. SMITH - IEEE J. of Qu. El. QE-1, n°8, p.343 (1965).

[38] - R. DAMASCHINI - Comptes Rendus 268, p.1169 (1969).

[39] - E. PELLETIER - Laboratoire Aimé Cotton, Orsay. Communication personnelle. (voir aussi Thèse Orsay, 1970).

[40] - T.J. BRIDGES, J.W. KLUVER - Appl. Opt. 4, p.1121 (1965).

[41] - (voir [20]).

[42] - R. VETTER - Comptes Rendus 268, p.1293 (1969).
- Phys. Letters 31A, p.559 (1970).

[43] - R.J. CHAMPEAU - Thèse, Orsay (1969).
- J.M. HELBERT - Thèse, Orsay (1969).

[44] - J. BROCHARD, J.F. LESPRIT, S. LIBERMAN - Comptes Rendus 270, p.600 (1970).

[45] - C.L. PEKERIS - Phys. Rev. 127, p.509 (1962).
- B. SCHIFF, C.L. PEKERIS - Phys. Rev. 134, p.638 (1964).

[46] - J. BAUCHE - Thèse, Orsay (1969).

[47] - Voir par ex. H.G. KUHN - Atomic Spectra, Longmans (1962).

[48] - J.M. BURGER, A. LURIO - Phys. Rev. Lett. 22, p.755 (1969).

[49] - M. KLAPISCH - Thèse, Orsay (1969).

[50] - S. FENEUILLE - Thèse, Paris (1967).

[51] - Cl. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE - Ann. Phys. 3, p.341 (1968).

[52] - Cl. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE - J.O.S.A. 58, p.704 (1968).

[53] - Y. BORDARIER, B.R. JUDD, M. KLAPISCH - Proc. Phys. Soc. 289, p.81 (1965).
(voir aussi [69]).

[54] - J.C. HUBBS, G.M. GROSOF - Phys. Rev. 104, p.715 (1956).

[55] - J.T. LATOURETTE, W.E. QUINN, N.F. RAMSAY - Phys. Rev. 107, p.1202 (1957).

[56] - (voir [36]).

[57] - (voir [35]).

[58] - H. KOPFERMANN, E. RINDAL - Zeit. für Phys. 87, p.460 (1934).

[59] - E.G. JONES - Proc. Roy. Soc. 144, p.587 (1934).
- Proc. Phys. Soc. 46, p.634 (1934).

[60] - S. LIBERMAN - Comptes Rendus 266, p.236 (1968).

[61] - S. LIBERMAN - J. de Phys. 30, p.53 (1969).

[62] - (voir [33]).

[63] - H.B.C. CASIMIR - On the interaction between atomic nuclei and electrons. San Francisco, Freeman and Co (1963).

[64] - P.G.H. SANDARS, J. BECK - Proc. Phys. Soc. A289, p.97 (1965).

[65] - B.R. JUDD - Théorie de la structure hyperfine - Cours à la Faculté des Sciences de Paris (1964).

[66] - H.J. SCHAFER - Phys. Inst. Univ. Marburg . Communication personnelle.

[67] - B.R. JUDD - La structure hyperfine des atomes et des molécules, Ed. CNRS Paris (1966) - p.311.

[68] - Cl. BAUCHE-ARNOULT - Proc. Phys. Soc. (1970) à paraître.

[69] - B. R. JUDD - Proc. Phys. Soc. 82, p.874 (1963).

[70] - J. BAUCHE, B.R. JUDD - Proc. Phys. Soc. 83, p.145 (1964).

[71] - H.P. KELLY - Phys. Rev. 173, p.142 (1968).

[72] - E. KOENIG - Thèse 3e cycle, Orsay(1970).

[73] - A.G. FOX, T.LI - Bell Syst. Tech. J. 40, p.453 (1961).

[74] - G.D. BOYD, H. KOGELNIK - Bell Syst. Tech. J. 41, p.1347 (1962).

[75] - L. ALLEN, D.G.C. JONES - Principles of gas lasers, Butterworths-London (1967).

[76] - Y. BORDARIER, P. DAGOURY - Programme DIAGAC. Diagonalisation et calcul des dérivées des énergies et des facteurs de Landé. Brochure disponible au Laboratoire Aimé Cotton.

- Y. BORDARIER - Programme GRAMAC. Optimisation des paramètres par moindres carrés.

- Y. BORDARIER, A. CARLIER - Programme AGENAC. Calcul des formules suivant l'algèbre de Racah.

- Y. BORDARIER - Programme ASSAC. Regroupement des résultats de AGENAC.